

TÍTULO:	Metalofármacos inteligentes 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 20s e uma morte a cada 50s. Embora seja tratável quando diagnosticado precocemente, o cancro da mama avançado ou metastático é incurável devido à falta de uma terapia eficaz.</p> <p>O Grupo de Química Biorganometálica da FCUL tem vindo a desenvolver metalofármacos inteligentes seletivos para o cancro da mama metastático. A estrutura destes metalofármacos 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 terapêutica através da libertação controlada do fármaco seletivamente no seu alvo/local de ação. Mais, está estabelecido que a ligação e o transporte deste género de metalofármacos a proteínas séricas (albumina (HSA), transferrina (hTf)) podem influenciar a sua biodisponibilidade e entrega às células, sendo este um ponto de controlo de potencial terapêutico imprescindível.</p> <p>Neste momento já identificamos um metalofármaco líder com potencial para ser utilizado como um agente de terapia de precisão, encontrando-se a sua avaliação já numa fase avançada de desenvolvimento. Neste contexto o presente projeto pretende focar-se no estudo das interações deste composto com as proteínas séricas, num trabalho colaborativo com o laboratório de Proteínas e Amilóides em Biomedicina (FCUL).</p> <p>O trabalho proposto compreende as seguintes vertentes:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) Síntese e caracterização do metalofármaco inteligente líder; 2) Avaliação da interação do metalofármaco líder com as proteínas HSA e hTf, assim como o seu impacto na estabilidade das proteínas alvo, por diferentes técnicas espectroscópicas. <p>Este projeto permitirá ao aluno adquirir importantes competências em síntese organometálica e peptídica e em diversas técnicas de caracterização molecular (NMR, HPLC, fluorescência, dicroísmo circular (CD) ou DSF (Differential Scanning Fluorimetry)).</p>
LOCAL DE TRABALHO:	Lab 8.5.46 e 8.5.56
ORIENTADOR(S):	Tânia Morais (tsmorais@fc.ul.pt); Bárbara Henriques (bjhenriques@fc.ul.pt)
ALUNO(A)	

TÍTULO:	Design de agentes teranósticos para o cancro: síntese de compostos organometálicos contendo cumarinas
RESUMO:	<p>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.</p> <p>Este projeto visa explorar essas limitações através do desenvolvimento de agentes teranósticos com dupla ação de diagnóstico precoce e terapia. O Grupo de Química Organometálica da FCUL têm se dedicado a desenvolver complexos de Ru-ciclopentadienilo (RuCp) e Co-ciclopentadienilo (CoCp) que mostraram ser bastante eficazes para o vários tipos de cancro <i>in vitro</i> e <i>in vivo</i>. [1-3] Neste projeto serão desenvolvidos novos complexos organometálicos de ruténio(II) e/ou cobalto(III) contendo ligandos fluorescentes do tipo cumarinas e o estudo da suas potencialidades como agentes teranósticos.</p> <p>O trabalho compreende as seguintes vertentes:</p> <ul style="list-style-type: none"> i) Síntese e caracterização das sondas orgânicas (cumarinas); ii) Síntese e caracterização dos agentes teranósticos de “RuCp” e “CoCp”; iii) Caracterização pelas técnicas espectroscópicas usuais: FT-IR, UV-vis. e NMR. Serão realizadas análises elementares para obter uma garantia da pureza dos compostos. A estrutura cristalina será determinada por difração de raios-X; iv) Avaliação das propriedades de imagem das sondas/agentes teranósticos; v) Avaliação das potencialidades anti-tumorais dos complexos de Ru /agentes teranósticos em linhas celulares tumorais e não-tumorais humanas (em colaboração, não será efetuado pelo aluno). <hr/> <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>Inorg. Chemistry</i>, 2024, 63(13), 5783–5804</p>
LOCAL DE TRABALHO:	DQB, Edifício C8, Laboratório 8.5.46
ORIENTADOR(S):	Tânia Morais (tsmorais@fc.ul.pt ; www.arrows2cancer.com)
ALUNO(A)	

TÍTULO:	Síntese e caracterização de novos catalisadores sustentáveis derivados de cinzas volantes
RESUMO:	<p>A utilização efetiva de resíduos industriais produzidos em grande escala tornou-se recentemente um tema de interesse considerável na procura de um futuro sustentável. As cinzas volantes, que são o resíduo sólido da combustão de carvão em centrais termoelétricas, são geralmente deitadas em aterros ou despejadas no mar onde representam uma séria ameaça para o ambiente e para a saúde humana, uma vez que contêm vestígios de metais tóxicos que podem lixiviar para o meio ambiente. Neste contexto tem sido investigada a valorização destes resíduos em vários domínios. Atendendo a que são compostos ricos em SiO_2 e Al_2O_3 uma das possibilidades para a valorização destes resíduos é a síntese de zeólitos e sua posterior aplicação como catalisadores heterogéneos. Assim, neste trabalho, pretende-se desenvolver geopolímeos à base de cinzas volantes como novos catalisadores heterogéneos do tipo zeolítico.</p> <p>O plano de trabalho deste estudo terá fundamentalmente 3 partes que serão em muitos momentos desenvolvidas em paralelo:</p> <p>1º desenvolvimento do protocolo de síntese dos zeólitos a partir de cinzas volantes.</p> <p>2º caracterização dos materiais por diferentes técnicas, nomeadamente, difração de raios-X de pós; adsorção de N_2; microscopia eletrónica de varrimento e de transmissão; adsorção de piridina seguida por IV.</p> <p>3º exploração das propriedades catalíticas em reações de interesse industrial, como por exemplo acilações de Friedel-Crafts. Para avaliar a sustentabilidade do processo serão feitos ensaios de re-utilização dos catalisadores usados, sendo para tal testados diversos processos de regeneração.</p>
LOCAL DE TRABALHO:	<p>Laboratório (8.3.60) – preparação e caracterização dos materiais</p> <p>Laboratório de Química Física e Catálise ISEL – testes catalíticos</p>
ORIENTADOR(S):	<p>Ana Paula Carvalho (DQB-FCUL)</p> <p>Angela Martins (DEQ-ISEL)</p>
ALUNO(A)	

TÍTULO:	Determinação de iões solúveis na matéria particulada fina (PM_{2.5}), em ambientes de sono
RESUMO:	<p>A qualidade do ar é considerada um dos principais fatores que influenciam a saúde humana, sendo a matéria particulada (PM), em especial a sua fração fina (PM_{2.5}), um dos principais poluentes. Para determinar a real exposição humana à PM e assim avaliar corretamente o seu impacto na saúde, é essencial considerar uma abordagem integrada de todos os microambientes em que os indivíduos se encontram ao longo das 24 horas. Nos últimos anos os ambientes de sono ganharam a atenção da comunidade científica dado que os seres humanos passam cerca de um terço da vida a dormir e o sono é essencial para o bem estar, desempenho e saúde dos indivíduos, embora estes ambientes sejam ainda pouco estudados, pelas dificuldades de implementação que envolvem.</p> <p>A presente proposta de trabalho vem na sequência do projeto HypnosAir (https://hypnosair.com/), financiado pela FCT. Em estudos prévios realizados pela equipa do HypnosAir, conclui-se que as concentrações de PM_{2.5} em ambiente de sono ultrapassam, frequentemente, os valores limite da legislação nacional e valores guia da OMS [1,2].</p> <p>No projeto Hypnosair, realizou-se a monitorização/amostragem, durante 4 noites/casa, em 30 habitações da Área Metropolitana de Lisboa, entre maio de 2023 e maio de 2024. Foram monitorizados o CO₂, CO, formaldeído, COV, PM_{2.5}, PM₁₀ e parâmetros físicos (temperatura e humidade relativa).</p> <p>A PM_{2.5} foi amostrada em filtros, utilizando amostradores de médio volume, colocados nos quartos e no exterior das 30 habitações.</p> <p>As concentrações de PM_{2.5} foram determinadas gravimetricamente e a PM_{2.5} recolhida nos filtros será caracterizada em termos da sua composição química, por diferentes técnicas.</p> <p>Na presente proposta de trabalho pretende-se:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Determinar a concentração dos iões inorgânicos solúveis (catiões e aniões) da PM_{2.5} recolhida neste conjunto robusto de filtros, por cromatografia iónica, sendo estimadas as incertezas associadas à sua quantificação; • Identificar associações estatisticamente significativas entre estes e outros componentes da PM_{2.5} (nomeadamente o Carbono Negro) determinados nestes filtros, de forma a identificar fontes de emissão comuns. <p>A determinação das concentrações de iões em PM_{2.5} será fundamental para, numa fase posterior, através de ferramentas estatísticas, ser determinada a contribuição das fontes de emissão que afetam a qualidade do ar durante o sono (para definição de medidas de mitigação e boas práticas), prevendo-se neste âmbito a publicação de 1 artigo em revista científica e 1 comunicação em conferência.</p> <p>[1] Canha et al., Comparison of indoor air quality during sleep in smokers and non-smokers' bedrooms: A preliminary study, Canha et al. Environmental Pollution 249 (2019) 248-256, https://doi.org/10.1016/j.envpol.2019.03.021</p> <p>[2] Canha et al. (2020) Compliance of indoor air quality during sleep with legislation and guidelines – a case study of Lisbon dwellings. Environmental Pollution 264, 114619, https://doi.org/10.1016/j.envpol.2020.114619</p>
LOCAL DE TRABALHO:	Lab. 8.3.09 DQB
ORIENTADOR(S):	Doutora Cristina Oliveira (DQB/FCUL) e Doutora Carla Gamelas (C2TN/IST)
ALUNO(A)	

TÍTULO:	Development and evaluation of DprE1 inhibitors as as antitubercular drugs
RESUMO:	<p>Drug resistance is a major obstacle to tuberculosis treatment, and new, more effective drugs are urgently needed. Our laboratory has been developing with success prodrugs that address efficiently pyrazinamide resistance and demonstrate activities higher than the reference molecule^{1,2}. This work let do the development of dinitrobenzamide derivatives that have also shown very promising activity against <i>M. tuberculosis</i>^{3,4}. Our most active compounds are structurally similar to DNB1, and related molecules that are described as inhibitors of the enzyme decaprenylphosphoryl-β-D-ribose oxidase (dprE1)⁵. We believe that our compounds may act in the same target and, therefore, we are currently exploring the mechanism of action and expanding our library of active compounds in order to obtain potential new antitubercular compounds⁶.</p> <p>We are proposing a master thesis theme based on the development of antitubercular drugs targeting DprE1 and the exploration of the mechanism of action of the compounds. The work will consist of a combination of molecular simulations and laboratory work to complete our in-house library of compounds. The student will perform molecular dynamics studies with our library of compounds and will complete the library according to the needs of the computational work.</p> <p>The computational work will be performed at FCUL and the laboratory work will be done at FFUL.</p> <p>The computational work will involve the use of molecular dynamics simulations with coarse-grained and all-atom force fields to assess the residence times and specificity of the compounds towards the binding targets. Further, binding affinities will be estimated, and the binding mechanism assessed through molecular simulations.</p> <p>Synthetic methods for the dinitro benzamide family of compounds were previously developed in the lab and are easily adapted to the synthesis of new compounds to complete the library. The assessment of activity will be based in the determination of the minimal inhibitory concentration (MIC) and minimal bactericidal concentration (MBC) values against <i>M. tuberculosis</i> (control strain) and will be supported by the mycobacteriology lab.</p> <p>The final outcome of the thesis will be the proposal of new derivatives based on the results from the computational studies.</p>
LOCAL DE TRABALHO:	Local de estágio: Imed-UL- Faculdade de Farmácia da UL /FCUL C8 Piso 5 Workspace
ORIENTADOR(S):	Orientador: Luis Constantino (FCUL-FFUL) constant@ff.ul.pt +351965488519 coorientador Nuno Galamba (FCUL) njgalamba@fc.ul.pt +351967808964
ALUNO(A)	

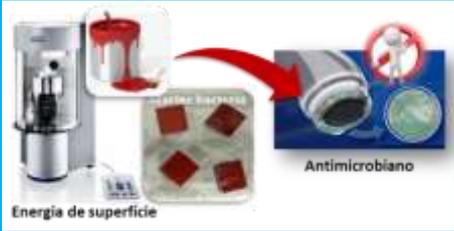
TÍTULO:	Avaliação detalhada da incerteza da medição de mercúrio em amostras de água
RESUMO:	<p>O Laboratório de Química e Poluição do Meio Marinho do Instituto Hidrográfico (IH-LQPM) da Marinha Portuguesa, tem mais de cinquenta anos de experiência na monitorização do meio aquático. O IH-LQPM é acreditado 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.</p> <p>Este projeto envolve o desenvolvimento de modelos detalhados da incerteza da medição de mercúrio, por espectrometria de absorção atômica-vapor frio 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.</p> <p>Serão propostas formas de otimização da incerteza da medição com vista ao cumprimento dos mais exigentes critérios de qualidade [3].</p> <p>Referências:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Carla Palma, Vanessa Morgado, Ricardo J. N. Bettencourt da Silva, Top-down evaluation of matrix effects uncertainty, <i>Talanta</i> 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, <i>Analytical Chemistry</i> 91 (2019) 5698-5705 3. Ricardo J. N. Bettencourt da Silva, Alex Williams (Eds.), <i>Eurachem/CITAC Guide: Setting and Using Target Uncertainty in Chemical Measurement</i>, Eurachem, 2015
LOCAL DE TRABALHO:	Instituto Hidrográfico
ORIENTADOR(S):	Carla Palma
ALUNO(A)	

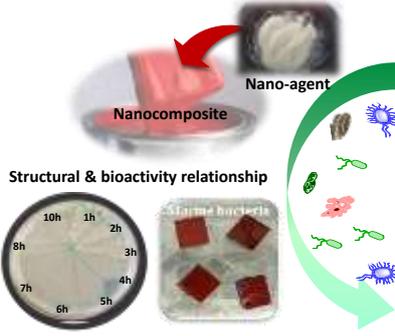
TÍTULO:	BREATH-PATH: Análise de perfis de compostos orgânicos voláteis em amostras de ar exalado da respiração para a gestão de cancro de pulmão em doentes com indicação cirúrgica.
RESUMO:	<p>O cancro do pulmão é a principal causa de morte por cancro no mundo. A ressecção cirúrgica é o tratamento de escolha para o cancro de pulmão de células não pequenas (NSCLC) em estadio inicial. A recidiva tumoral é a causa mais comum de falha no tratamento após a ressecção. Um número considerável de doentes com cancro do pulmão em estadios I-III terá recidiva local (22-50%) ou à distância (3-20%) após tratamento com intenção curativa [1]. Portanto, compreender a eficácia do tratamento, ou o seu fracasso, logo no início é primordial e poderá melhorar o prognóstico. Presentemente, a recidiva de cancro do pulmão após cirurgia com intenção curativa é avaliada, periodicamente, por exames de imagem (principalmente tomografia computadorizada). A recidiva só será detetada havendo uma alteração suspeita na imagem, o que na verdade ocorre apenas meses após a real recidiva da doença.</p> <p>A análise química aos compostos orgânicos voláteis (COV) do ar exalado da respiração é um método não invasivo promissor para a deteção e tratamento do cancro de pulmão [2]. O ar expirado contém uma mistura complexa de COVs que são produzidos como produtos finais do metabolismo. São emanados da membrana das células tumorais e dos tecidos circundantes para a corrente sanguínea e excretados por difusão através da membrana alveolar-capilar pulmonar e exalados pela respiração [3]. Existe assim uma assinatura única de COVs no contexto do cancro do pulmão.</p> <p>Tendo em conta este pressuposto este estudo pretende:</p> <ul style="list-style-type: none"> • avaliar se ocorre alteração do perfil de COV em doentes com cancro do pulmão submetidos a cirurgia, ao longo do seguimento pós-cirúrgico; • estabelecer que o perfil de COVs muda com a atividade da doença podendo ser uma ferramenta importante para reconhecer a recidiva de cancro do pulmão antes da manifestação imagiológica; • estabelecer o uso da Cromatografia Gasosa/Espectrometria de Mobilidade Iónica (GC/IMS) como técnica para a análise dos COVs presentes no ar exalado para este fim; • acompanhar o tratamento de forma mais rápida e eficiente aumentando, concomitantemente, as taxas de sobrevivência. <p>Bibliografia</p> <p>[1] H. Uramoto, F. Tanaka, <i>Trans Lung Cancer Res</i> 3 (2014) 242-249 [2] R.J. Keogh, J.C. Riches, <i>Curr Oncol</i> 29 (2022) 7355-7378 [3] F. Schmidt et al., <i>Lung Cancer</i> 175 (2023) 131-140</p>
LOCAL DE TRABALHO:	Unidade de Pulmão, Fundação Champalimaud
ORIENTADOR(S):	Pedro Duarte Vaz (pedro.vaz@fundacaochampalimaud.pt) Rita Barata (rita.barata@fundacaochampalimaud.pt)
ALUNO(A)	

Título:	Máquinas moleculares baseados em actuadores magnéticos (Molecular machines based on magnetic actuators)
Resumo:	<p>Este projeto será desenvolvido como parte de uma cooperação bilateral (Programa Pessoa) entre o Laboratório “Inorganic Molecules and Materials Lab” no DQB e o “Institut de Chimie de la Matière Condensée de Bordeaux” em Bordéus, França, incluindo um período de formação pago de cerca de 1 mês no Laboratório do parceiro francês.</p> <p>Pretende-se explorar a síntese e as propriedades estruturais e magnéticas de moléculas que combinem a transição de spin com efeitos termosaliente ou fotosaliente. Adicionalmente, tenciona-se proceder à fabricação de filmes ultra-finos com estas moléculas com efeitos de transporte controlados. Desta forma, irá produzir-se materiais de dimensões e formas controladas, de forma a fabricar reprodutivelmente actuadores magnéticos moleculares.</p> <p>A primeira parte da tese trata da síntese e caracterização básica de compostos que apresentem propriedades de transição de spin em conjunto com os efeitos termosaliente ou fotosaliente.</p> <p>A segunda parte inclui a caracterização magnética sistemática e minuciosa dos diferentes complexos usando a magnetometria de SQUID, a espectroscopia de Mössbauer com ^{57}Fe e a espectroscopia de EPR.</p> <p>A terceira parte dedica-se ao estudo da irradiação electromagnética das amostras, à produção de filmes ultra-finos e aos estudos das suas propriedades de transporte.</p>
Local de trabalho:	Laboratórios 8.6.40 e 8.6.41 e Institut de Chimie de la Matière Condensée de Bordeaux
Orientador(s):	Paulo N. Martinho (pnmartinho@fc.ul.pt) Patrick Rosa (patrick.rosa@icmcb.cnrs.fr)
ALUNO(A)	

TÍTULO:	Análise e Caracterização de tintas de escrita por LC- Orbitrap MS
RESUMO:	<p>No vasto mundo que é o das ciências forenses é permanente a necessidade de caracterização, diferenciação e/ou o estabelecimento de relação entre materiais diversos. As tintas de instrumentos manuais de escrita são uma das substâncias alvo deste tipo de análise. Para além das aplicações correntes destas tintas, também estão envolvidas em inúmeros tipos de crimes como a falsificação de documentos, fraudes/burlas, furtos, entre outros.</p> <p>Para dar resposta a quesitos formulados pela investigação, no sentido de contribuir para a solução destes crimes, torna-se necessário recorrer a metodologias analíticas avançadas.</p> <p>Propõe-se neste projeto um estudo de caracterização de tintas de escrita azuis e pretas existentes na coleção do LPC-PJ, por forma a identificar os seus componentes por LC- Orbitrap MS.</p>
LOCAL DE TRABALHO:	Setor de Físico-Química do Laboratório de Polícia Científica
ORIENTADOR(S):	Ana Cristina Assis
ALUNO(A):	

TÍTULO:	Melhoramento da atividade biocida para o controlo sustentável do nemátode da madeira do pinheiro
RESUMO:	<p>O nemátode da madeira do pinheiro (NMP) é um animal microscópico, vermiforme, cujo nome científico é <i>Bursaphelenchus xylophilus</i>, e que causa a doença da murchidão do pinheiro (DMP). Em Portugal, o NMP é uma espécie invasora, tendo sido introduzido através da importação de materiais embalados em madeira infetada não tratada de origem asiática, zona onde este organismo causou já elevada mortalidade em pinheiros. O seu controlo recorre a pesticidas comerciais, cujo uso têm nocivos impactos ambientais e na saúde humana. O desenvolvimento de novos biopesticidas passa pela investigação de compostos menos agressivos para o meio ambiente e pela modificação estrutural de compostos com estruturas ativas, já identificadas por nós, de modo a melhorar a sua atividade nematicida. No seguimento dos resultados positivos com compostos alifáticos de óleos essenciais, direcionou este estudo para a modificação química enantioselectiva. Nesta estratégia os novos derivados serão avaliados através de ensaios de contato direto com o <i>B. xylophilus</i>, por nós já implementados, possibilitando o desenvolvimento de bionematicidas de atividade melhorada.</p> <p>Neste trabalho, recorrer-se-á a metodologias de:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Nematologia, na identificação e manutenção de linhas puras do NMP; - Química, na obtenção de derivados alifáticos modificados por síntese assimétrica e respetivos testes contra o NMP; estudo da relação estrutura-atividade nematicida; - Biotecnologia Vegetal, no recurso a culturas in vitro de pinheiro-bravo para a validação de atividade nematocida em ambiente de infeção. <p>O objetivo final consiste na identificação das diretrizes químicas que regem a atividade nematicida destes compostos, na sua integração para o desenvolvimento de compostos alvo com aumento da atividade e na sua validação funcional in vitro.</p>
LOCAL DE TRABALHO:	Laboratório da FCUL (8.2.55) e Laboratório de Nematologia do Instituto Nacional de Investigação Agrária e Veterinária (INIAV), Oeiras.
ORIENTADOR(S):	Doutora Cristina Moiteiro (FCUL) e Doutor Jorge M. S. Faria (INIAV)
ALUNO(A)	

TÍTULO:	Designing Physicochemical Surface Properties of Novel Nanocomposite Coatings for Biofilm Prevention on Industrial Surfaces
RESUMO:	<p>The spontaneous colonization of microorganisms on submerged surfaces, promoting the formation of biofilms, is a global concern for all infrastructures, such as water distribution and treatment systems, maritime operations, biomaterials, food/beverage systems, and many others. Biofilms lead to severe consequences, including premature biocorrosion of materials, estimated to affect up to 20% of corrosion in aqueous systems, resulting in billions of dollars spent solely on rehabilitation costs, and biocontamination of the surrounding environment (fluids, water, etc.), posing a significant risk to the sustainability of industrial systems and public health. Disinfection or elimination of these biofilms is a critical and challenging process. One emerging strategy involves the development of non-toxic antimicrobial nanocomposite coatings, i.e., containing bioactive nano-agents. These innovative modifications alter the surface energy properties of the generated coatings, making it crucial to correlate them with the bioactivity and physicochemical properties of the new coatings to contribute to their optimization and suitability for application.</p> <p>Core R&D objectives of the project: To develop nanocomposite coatings and investigate the relationship between the surface physicochemical properties of these coatings and their bioactivity to infer long-lasting antimicrobial effects on surfaces for various applications.</p>  <p>The key work activities comprise:</p> <ul style="list-style-type: none"> (i) Preparation of antimicrobial nanocomposite coatings with specific formulations, followed by optimization and application onto polymeric substrates using the spin coating technique. (ii) Comprehensive physicochemical characterization of the nanocomposite coatings, including the determination of wettability and surface energy of the coated substrates in simulated freshwater and saline media in static and dynamic modes. (iii) Evaluation of relationships between wettability, antimicrobial susceptibility, and physicochemical properties with Atomic Force Microscopy -AFM (e.g., surface topography of polymeric coating matrix, via roughness, young modulus, etc.) and ATR-FTIR spectroscopy of the coatings. This may also involve additional assessments of the morphology and surface distribution of bioactive nano-agents. (iv) Dissemination of the work, which may include contributions and participation in events. Dissertation preparation.
LOCAL DE TRABALHO:	The work will be performed at the Laboratories 8.6.42, 8.3.55. e 8.4.22 (FCUL).
ORIENTADOR(S):	Elisabete R. Silva DQB- Contact: ersilva@ciencias.ulisboa.pt Maria da Soledade Santos DQB - Contact mssantos@fc.ul.pt Ana P. Carapeto DF - Contact: apcarapeto@ciencias.ulisboa.pt
ALUNO(A)	

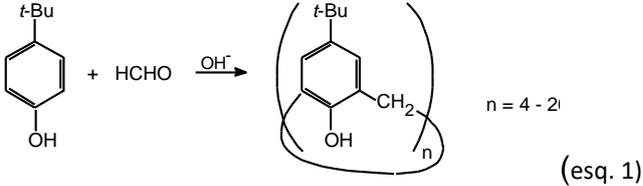
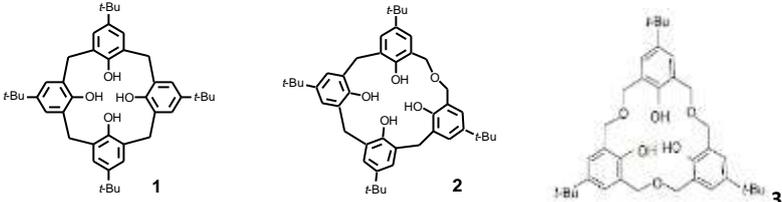
TÍTULO:	Desenvolvimento de nanopartículas bioativas para a prevenção da bioincrustação em superfícies
RESUMO:	<p>A colonização espontânea de microorganismos em superfícies, promovendo a formação de biofilmes, são uma preocupação global para todas as infra-estruturas da sociedade, por exemplo, sistemas de gestão de serviços de água (ex., distribuição e tratamento de água).</p> <p>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. 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, tendo-se como objetivo 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>  <p>As principais atividades do plano de trabalho compreendem:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Desenvolver estratégias de funcionalização química e de incorporação para suportar os agentes bioativos em nano-substratos. • Caracterização físico-química dos nano-agentes, como por exemplo, espectroscopia por infravermelhos (FTIR-DRIFT). Os nano-agentes serão ainda estudados recorrendo a outras técnicas de caracterização, de entre elas, Difração de raios X (DRX) ou de fotoeletrões de raios-X (XPS), bem como no que respeita à sua suscetibilidade antimicrobiana e de ecotoxicidade que serão realizadas em colaboração com equipas externas ao presente projeto. <p>(i) Os nano-agentes mais promissores serão incorporados em revestimentos comerciais, o que requer a otimização das formulações obtidas. As formulações de revestimento otimizadas serão usadas para revestir placas com recurso a um <i>spin coater</i> e a um <i>doctor blade</i>. Os filmes serão avaliados quando à libertação do agente biocida dos revestimentos, através de testes de lixiviação (ISO 15181) e da determinação do teor de agente lixiviado por HPLC-MS/MS (serviço externo). Protótipos revestidos serão também sujeito a prova de conceito no que respeita à sua bioatividade contra a formação de biofilme em condições laboratoriais e simuladas, que serão realizados em colaboração com a Universidade do Porto.</p> <p>(ii) As melhores formulações serão caracterizadas em termos de propriedades finais dos revestimentos para avaliar o seu potencial de aplicação industrial. Incluindo técnicas que permitem avaliar por exemplo a rugosidade (rugosómetro), espessura e adesão (<i>cross-cut test</i>).</p> <p>(iv) 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>
LOCAL DE TRABALHO:	O trabalho será essencialmente desenvolvido no laboratório 8.6.42
ORIENTADOR(S):	Elisabete R. Silva Contato: ersilva@ciencias.ulisboa.pt Noelia Garcia Contato: nlgarcia@ciencias.ulisboa.pt
ALUNO(A)	

TÍTULO:	Deposição de moléculas inorgânicas e materiais em superfícies para dispositivos de spin(ele)trónica
RESUMO:	<p>Este projeto será desenvolvido como parte de uma cooperação bilateral (Programa FCT-DAAD) entre o Laboratório “Inorganic Molecules and Materials Lab, IM2” no DQB e a “Faculty of Physics, University of Duisburg-Essen” em Duisburgo, Alemanha, incluindo um período de formação pago de cerca de 1 mês no Laboratório do parceiro alemão.</p> <p>A necessidade de desenvolver dispositivos em todo o mundo baseia-se na busca por eficiência energética e inovação tecnológica, permitindo avanços em armazenamento de dados, inteligência artificial e computação quântica, enquanto contribui para a sustentabilidade e competitividade global. Esses dispositivos desempenham um papel fundamental em várias áreas da eletrónica, oferecendo soluções para desafios contemporâneos e impulsionando o progresso tecnológico à escala global. Este projeto situa-se na vanguarda da investigação em química e física de materiais, combinando conceitos de química inorgânica, eletroquímica e física.</p> <p>Objetivos:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Síntese de complexos de Fe(III) e sua caracterização usando espectroscopia de infravermelho, análise elementar, e raios-X de cristal único, magnetometria de SQUID. - Síntese e caracterização de estruturas metalo-orgânicas contendo Fe(II) como centros metálicos e sua caracterização usando difração de raios-X, espectroscopia de infravermelho e adsorção de azoto. - Deposição dos complexos e materiais preparados em filme. Os complexos serão depositados no parceiro alemão e os materiais no DQB. - Estudo das propriedades de spintrónica e electrónicas dos filmes através da magnetometria de SQUID (DQB), microscopia de varrimento de túnel (parceiro alemão) e voltametria cíclica (DQB).
LOCAL DE TRABALHO:	Laboratórios 8.6.40 e 8.6.41 e Faculty of Physics, University of Duisburg-Essen
ORIENTADOR(S):	Sara Realista (smrealista@fc.ul.pt), Manuel Gruber (manuel.gruber@uni-due.de)
ALUNIO	

TÍTULO:	Biohybrid Enzyme-Graphene Nanometal Architectures as Highly Efficient Multifunctional Antimicrobial agents
RESUMO:	<p>Current global challenges in industry, healthcare, and the environment have driven the exploration and study of new materials that can help combat major problems and needs through new approaches. Within this development, nanomaterials have been a key part. In particular, metal nanoparticles (MeNPs) have been described to show excellent characteristics to inhibit different types of bacteria and microorganisms. The potential effect of nanoparticles compared to bulk material is that the nanoscale size provides a large surface-to-volume ratio that maximizes the contact area and reactivity of the material, resulting in increased catalytic properties, including antibacterial. In addition, a wide range of nanomaterials has been developed, considering polymeric materials, silica, rare earth elements, carbon-based materials such as carbon nanotubes and graphene derivatives that have been used with different properties by themselves or directly doped with metallic particles as hybrid materials. For example, superhydrophobic coating materials with antimicrobial characteristics or antimicrobial peptide coating strategies have recently been developed as emerging and promising dental implant coating materials to reduce/prevent bacterial infections.</p> <p>The main activities of the work plan include:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Design and synthesis of nanometal architectures based on the creation of metal nanoparticles supported in graphene functionalised with bioagents (e.g. enzymes). 2. Physicochemical characterization of these nanoarchitectures, using X-ray diffraction (XRD) and scanning microscopy (SEM) or transmission microscopy (TEM). The nano-agents will also be studied using other characterization techniques, such as infrared spectroscopy (FTIR-ATR), X-ray photoelectron (XPS), or Raman spectroscopy as well as their antimicrobial susceptibility and ecotoxicity, which will be carried out in collaboration with teams external to this project. 3. The most promising nanoarchitecture will be incorporated into commercial coating to analyse it as an antifouling agent and obtain preliminary results of its effectiveness. The formulation will be characterized in terms of roughness (profilometer), thickness, and adhesion (cross-cut test), for example. 4. All work also includes dissemination activities, which may include contributions and participation in training events/actions and writing the thesis.
LOCAL DE TRABALHO:	The work will essentially be carried out in the laboratory 8.6.42
ORIENTADOR(S):	Noelia Losada Garcia Contact: nlgarcia@ciencias.ulisboa.pt Elisabete R. Silva Contact: ersilva@ciencias.ulisboa.pt
ALUNO(A)	

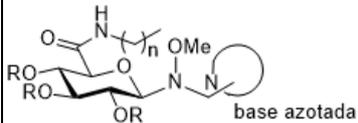
TÍTULO:	Caracterização de compostos bioativos extraídos de produtos naturais
RESUMO:	<p>Este trabalho visa a valorização de um importante resíduo da indústria alimentar, propondo a recuperação de compostos bioativos com potencial de aplicação terapêutica.</p> <p>Nos últimos anos, os compostos derivados de plantas tem suscitado interesse crescente, uma vez que alguns destes têm sido amplamente descritos como sendo compostos bioativos, com uma serie de efeitos benéficos reportados sobre a saúde e bem-estar.</p> <p>Neste trabalho propõe-se a identificação e caracterização dos compostos presentes numa infusão de folhas de uma planta com o objetivo de investigar o seu potencial bioativo. Dos compostos caracterizados por várias técnicas analíticas, como espetrometria de massa de alta resolução (HRMS) e quantificados por cromatografia líquida de alta eficiência com um detetor de rede de díodos (HPLC-DAD), serão determinadas algumas das suas propriedades bioativas, nomeadamente a sua atividade antioxidante a anticancerígena, em linhas celulares cancerígenas humanas. Os compostos mais promissores serão purificados por cromatografia líquida em coluna e caracterizados por espetroscopia de ressonância magnética nuclear (NMR). Posteriormente serão avaliadas as bioatividades dos compostos extraídos e investigado o possível efeito sinérgico destes compostos na infusão, a fim de compreender melhor o seu potencial terapêutico combinado.</p>
LOCAL DE TRABALHO:	Laboratórios do CQE-FCUL-ULisboa
ORIENTADOR(S):	Rita Pacheco (CQE- FCUL/ISEL) ripacheco@fc.ul.pt https://orcid.org/0000-0001-5192-3006
ALUNO(A)	

TÍTULO:	Permeabilidade de Péptidos em Membranas Modelo de Glóbulos Vermelhos através de Métodos de Simulação Molecular
RESUMO:	<p>A anemia falciforme(1) ou drepanocitose é uma doença genética associada à mutação de um único aminoácido na molécula de hemoglobina, resultando na forma de hemoglobina HbS. Esta tem uma solubilidade reduzida agregando em fibras, quando na forma desoxigenada, que distorcem os glóbulos vermelhos em forma de foice causando a doença da anemia falciforme. Esta doença tem uma prevalência elevada em alguns países de África e Ásia, e também no Brasil e nos EUA, existindo também na Europa, incluindo em Portugal.</p> <p>Neste projecto pretende-se estudar a permeação de fármacos da forma de péptidos para a anemia falciforme através de membranas modelo de glóbulos vermelhos. O estudo da permeação de vários péptidos modelo, previamente identificados como promissores(2) através de métodos <i>in silico</i>, na inibição da agregação da HbS, será realizado através de simulações por dinâmica molecular e métodos de amostragem preferencial como “umbrella sampling”. O projecto tem como objectivo comparar a permeação de péptidos lineares e cíclicos bem como de outros fármacos modelo, de modo a estabelecer relações entre o tamanho, forma, e natureza química dos aminoácidos com a sua permeação por difusão passiva.</p> <p>O candidato terá assim a oportunidade de aprender várias metodologias na área da termodinâmica e simulação molecular, em particular o métodos de dinâmica molecular, que permite estudar processos químicos e físicos a um nível molecular ajudando a interpretar resultados experimentais.</p> <p>Os estudantes seleccionados para este projecto, após registo da tese, são elegíveis para se candidatarem ao programa BioISI Junior que apoia 8 estudantes com uma bolsa BII de 6-meses. O critério de selecção baseia-se no mérito académico dos candidatos.</p> <p>(1) Martins, G. F., and Galamba, N. (2023) Protein aggregation-inhibition: a therapeutic route from Parkinson’s disease to sickle cell anemia. <i>Crit. Rev. Biochem. Mol. Biol.</i> 58, 50–80</p> <p>(2) Neto, V., Victor, B. L., and Galamba, N. (2023) Cyclic Peptides as Aggregation Inhibitors for Sickle Cell Disease. <i>J. Med. Chem.</i> 66, 16062–1607</p>
LOCAL DE TRABALHO:	FCUL, C8, Lab. 8.5.53
ORIENTADOR(S):	Nuno Galamba njgalamba@fc.ul.pt
ALUNO(A)	

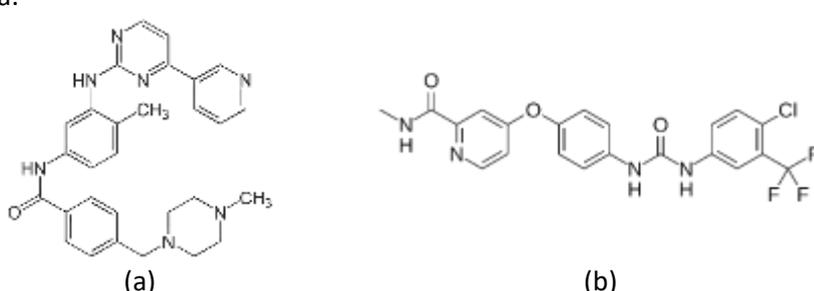
TÍTULO:	Síntese e Aplicações de Novos Receptores Fluorescentes Baseados em Calixarenos
RESUMO:	<p>A reacção de condensação do <i>p-ter</i>-butilfenol com formaldeído em meio básico conduz à formação de compostos macrocíclicos denominados calixarenos (esq. 1). Estes macrociclos têm atraído enorme atenção, particularmente no âmbito da química hospedeiro-hóspede e da química supramolecular. Representam uma classe muito versátil de receptores de iões e 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>Neste trabalho vão ser sintetizados calixarenos análogos ao calix[4]areno 1, nos quais as pontes CH₂ são parcial ou completamente substituídas por grupos CH₂OCH₂, nomeadamente derivados do <i>p-ter</i>-butildihomooxalix[4]areno (2) e/ou do <i>p-ter</i>-butilhexahomotrioxacalix[3]areno (3), contendo unidades fluorogénicas de naftaleno ou pireno.</p> <div style="text-align: center;">  </div> <p>Os novos compostos serão caracterizados através das técnicas usuais (p.f., IV, RMN de protão e carbono) e ainda determinada a sua conformação em solução por experiências de RMN 2D, como COSY e NOESY. A afinidade destes receptores relativamente a iões com relevância ambiental e biológica, e também a espécies neutras, como compostos nitroaromáticos (explosivos) será determinada por técnicas espectroscópicas, tais como RMN, absorção no UV-visível e fluorescência.</p>
LOCAL DE TRABALHO:	Edifício C8, 5º Piso, Lab. 8.5.35 (CQE)
ORIENTADOR(S):	Paula M. Marcos
ALUNO(A)	

TÍTULO:	Production of foldamers for proton- and neutron-capture in radiation therapy
RESUMO:	<p>Proton- and neutron-based radiotherapy have many advantages versus traditional procedures based on electrons and photon, but has been barely explored. In this project, we will develop a new class of drugs with antitumoral, antibacterial or antiamyloidogenic (for neurodegenerative disorders) properties. They will be based on foldamer chemistry, where synthetic helicoidal peptides with high affinity for different proteins and supramolecular structures will be doped with fluorine, boron or gadolinium. Exposure of these molecules to proton or neutron radiation will trigger a location-specific reaction which could destroy specific proteins or supramolecular complexes and/or kill particular cells (tumoral cells or microorganisms).</p> <p>To achieve our goal, we plan to fulfil the following tasks:</p> <p>Task 1. Monomer and foldamer synthesis (ITQB NOVA, Mateus' lab). The Fmoc-protected quinoline-derived monomers needed to build bacterial wall- and amyloid-binding foldamers are already available in the Mateus' lab, while monomers featuring fluorine, boron or gadolinium-chelating side chains will have to be synthesized. These can be prepared in 4 or 5 steps in multigram scale and with expected overall yields ranging from 20 to 60%. The foldamers will be prepared by microwave-assisted solid-phase synthesis and the purification will be performed by semi-preparative RP-HPLC. Synthesized compounds will be characterized by NMR spectroscopy and HRMS. Alternatively, we can conjugate foldamers with BODIPY stainings, that are both fluorescent and rich in Boron and Fluorine. All procedures are in place in Mateus' Lab, which has extensive experience in these synthetic approaches.</p> <p>Task 2. Evaluation of foldamers for biological activity (FCUL, Herrera's lab). For foldamers with potential antitumoral or antibacterial properties, Mammalian cancer cell lines or <i>Deinococcus radiodurans</i> bacteria will be incubated with different concentrations of the foldamers and irradiated with protons (and probably neutrons) at different intensities, as a function of distance from the source and time of exposure. Their viability will be analyzed by cell and molecular biology methods available at Herrera's lab. A similar approach will be carried out for the effect of foldamers on amyloids, this time irradiating cells expressing mutant huntingtin, an amyloidogenic protein that causes Huntington's disease.</p> <p>This MSc project will aim at training students in a combination of chemistry, physics and cell and molecular biology methods, producing a unique mixed profile with biomedical applications.</p>
LOCAL DE TRABALHO:	FCUL (Lisboa) and ITQB NOVA (Oeiras)
ORIENTADOR(S):	Federico Herrera (Professor Auxiliar, DQB) and Pedro Mateus (Investigadora Principal, ITQB NOVA)
ALUNO(A)	

TÍTULO:	Materiais de carbono nanoporosos para dessalinização por processos de desionização capacitiva
RESUMO:	<p>A escassez de água estende-se agora a regiões anteriormente consideradas ricas em água, exigindo uma utilização e gestão de água mais alinhada com os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável. A dessalinização é fundamental para responder à crescente procura por água, especialmente nas regiões costeiras. Atualmente a dessalinização é assegurada com processos de osmose inversa mas a desionização capacitiva [1] pode ser uma solução promissora para a dessalinização de água salobra e salgada.</p> <p>O presente tema para dissertação de mestrado centra-se no desenvolvimento de materiais de carbono nanoporosos [2] como elétrodos para sistemas de desionização capacitiva. O aluno terá oportunidade de trabalhar com materiais comerciais, sub-produtos de processos industriais e ainda otimizar a síntese de materiais a partir de biomassa. Pretende-se avaliar o potencial dos vários materiais considerando nomeadamente o efeito da textura, do tamanho de partícula e da química superficial. Os materiais serão caracterizados recorrendo a várias técnicas de caracterização de materiais porosos (ex. adsorção de N₂ a -196 °C, FTIR, pH no ponto de carga zero, SEM-EDS) e também a ensaios eletroquímicos (ex. voltametria cíclica e cronoamperometria)</p> <p>O aluno terá oportunidade de desenvolver competências complementares na área dos materiais de carbono nanoporosos e em processos eletroquímicos de caracterização, tendo como objetivo a sua aplicação em dessalinização por desionização capacitiva sob a supervisão de especialistas que cobrem as diferentes especialidades deste tema.</p> <p>Referências</p> <p>[1] K. Sun, M. Tebyetekerwa, C. Wang, X. Wang, X. Zhang, X. S. Zhao (2023). Electrocapacitive Deionization: Mechanisms, Electrodes, and Cell Designs. <i>Advanced Functional Materials</i>, 33(18), Article 2213578. DOI: 10.1002/adfm.202213578</p> <p>[2] A.S. Mestre, A.P. Carvalho (2018) Nanoporous Carbon Synthesis: An Old Story with Exciting New Chapters, in: T.H. Ghrib (Ed.) <i>Porosity - Process, Technologies and Applications</i>, IntechOpen2017, DOI: 10.5772/intechopen.72476.</p>
LOCAL DE TRABALHO:	Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Dep. Química e Bioquímica (DQB, Lab. 8.3.60 e Lab 8.3.46)
ORIENTADOR(S):	Ana Sofia Mestre (DQB) e Jorge Correia (DQB)
ALUNO(A)	

TÍTULO:	Síntese de neonucleósidos contendo unidades de D-glucuronamida com potencial perfil biológico
RESUMO: (incluindo objetivos a atingir e técnicas a utilizar)	<p>Os compostos análogos ou miméticos a nucleósidos e a nucleótidos têm grande relevância em Química Medicinal devido à sua aptidão para inibir eventos biológicos dependentes de nucleós(t)idos, os quais são essenciais à vida, mas também são cruciais para o desenvolvimento de doenças, tais como a síntese dos ácidos nucleicos ou a sinalização celular [1]. Vários análogos de nucleós(t)idos tornaram-se fármacos eficazes contra o cancro ou infeções virais, sendo de destacar alguns dos medicamentos mais usados em quimioterapia ou os primeiros fármacos aprovados contra a COVID-19. Há, no entanto, algumas desvantagens associadas ao uso clínico destes grupos de compostos, nomeadamente a sua baixa disponibilidade oral e a aquisição de resistência das células cancerígenas ou de células infetadas face à sua ação. A procura de novas estruturas bioativas análogas a nucleós(t)idos que possam ultrapassar estas limitações e exibir mecanismos de ação alternativos continua, portanto, a ser de grande relevância.</p> <p>Neste contexto, o Grupo da Química dos Glúcidos tem focado o desenvolvimento de novos nucleósidos baseados em unidades de D-glucuronamida [2-4], um derivado monossacarídico relativamente pouco explorado neste âmbito. Várias moléculas <i>N</i>-dodeciladas deste tipo demonstraram atividades cancerígenas <i>in vitro</i> significativas, comparáveis ou superiores à de um fármaco de referência, nomeadamente contra linhas celulares do cancro da mama, e potencial para colmatar mecanismos de resistência quimioterapêutica. Nessas moléculas, a base azotada purínica encontra-se ligada à unidade de glucuronamida através de uma ligação N-glicosídica, ou através de um sistema (triazolil)metileno.</p> <p>Neste trabalho é proposta a síntese de novas moléculas análogas às já reportadas, mas contendo o motivo heteroaromático azotado ligado à unidade de glucuronamida através de um grupo alcoxiamina (Figura 1). Estes compostos de estrutura inovadora, designados por ‘neo’ nucleósidos, serão obtidos através da N-glicosilação de derivados de bases azotadas previamente funcionalizadas com um grupo alcoxiamina. As moléculas sintetizadas serão caracterizadas através de RMN, usando técnicas mono- e bidimensionais, da medição do poder rotatório, e do ponto de fusão, quando apropriado. Pretende-se obter um painel amplo de compostos, variando o padrão de substituição da unidade glicosídica e da base azotada, para posterior avaliação do seu potencial de bioatividade</p> <div style="display: flex; justify-content: space-between; align-items: flex-start;"> <div data-bbox="408 1590 766 1765" style="text-align: center;">  <p>Figura 1.</p> </div> <div data-bbox="782 1612 1331 1765" style="font-size: small;"> Refs: [1] Jordheim, LP <i>et al</i> (2013) <i>Nat Rev Drug Discov</i> 12:447. [2] Xavier NM <i>et al</i> (2017) <i>Org Biomol Chem</i> 15:4667. [3] Xavier NM <i>et al</i> (2019) <i>Pure Appl Chem</i> 91:10845. [4] Moreira T <i>et al</i> (2024) <i>ChemMedChem</i> 19:e202300608 </div> </div>
LOCAL DE TRABALHO:	Lab. de Química dos Glúcidos, 8.5.40/41
ORIENTADOR(S):	Nuno Manuel Xavier, nmxavier@fc.ul.pt
ALUNO(A)	

TÍTULO:	Armazenamento de gases em materiais nanoporosos e posterior libertação 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.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>O desafio final será a demonstração do controlo de processos biológicos com os novos materiais que libertam os gasotransmissores de forma lenta. Será efetuada uma avaliação preliminar da aplicação terapêutica à cicatrização de feridas. Estes resultados são uma primeira validação para aplicações tópicas.</p> <p>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>
LOCAL DE TRABALHO:	Edifício C8, salas 8.3.57 e 8.3.60
ORIENTADOR(S):	João Pires da Silva; jpsilva@fc.ul.pt ; ext. 28365; (http://webpages.fc.ul.pt/~jpsilva/)
ALUNO(A)	

TÍTULO:	Estudo de Polimorfismo em Compostos Antitumorais
RESUMO:	<p>A síntese seletiva de novas fases sólidas com estequiometria, empacotamento, morfologia e propriedades físicas específicas, a chamada engenharia de cristais (“crystal engineering”), é uma área científica de grande atualidade. Um dos maiores desafios neste âmbito é o controlo do polimorfismo, que consiste na existência de mais do que uma estrutura cristalina para a mesma substância. Este fenómeno é particularmente relevante para a indústria farmacêutica, pois cada polimorfo é encarado como um material diferente, que pode apresentar propriedades físicas muito distintas (e.g. cor, temperatura de fusão, solubilidade e velocidade de dissolução). O estudo do polimorfismo proporciona ainda uma oportunidade para investigar os mecanismos de cristalização e as interações que determinam os arranjos moleculares em estado sólido. Para isso são necessários, no entanto, dados que relacionam energética com estrutura de materiais sólidos, os quais nem sempre estão disponíveis na literatura.</p> <p>Neste trabalho pretende-se verificar a existência de polimorfismo no caso dos compostos antitumorais imatinib e sorafenib (Figura 1), e explorar esta característica para produzir materiais com melhores propriedades físicas. Uma pesquisa recente na base de dados Cambridge Crystallographic Database, revela que, apesar de serem conhecidos solvatos, sais e cocristais destes compostos, até ao momento não foram identificados polimorfos destes. Assim, o estudo de polimorfismo aqui proposto tem o potencial de permitir o desenvolvimento de novas formulações destes compostos farmacêuticos baseados em novas formas cristalinas.</p> <p>O trabalho aqui proposto envolve as seguintes etapas: i) cristalizar os compostos de diferentes solventes e identificar o material precipitado em cada experiência, recorrendo a, por exemplo, estudos de difração de raios-X e espectroscopia de infravermelho; ii) explorar métodos de cristalização em nanomateriais, como o objetivo estabilizar núcleos de formas cristalinas metaestáveis; iii) estabelecer um protocolo experimental para preparar reprodutivamente cada uma das fases cristalinas dos compostos; iv) caracterizar as fases obtidas energeticamente e avaliar a sua estabilidade relativa.</p>
	 <p style="text-align: center;">Figura 1. (a) Imatinib; (b) Sorafenib.</p>
LOCAL DE TRABALHO:	Lab. 8.3.49-8.3.53
ORIENTADOR(S):	Carlos Bernardes; Fátima Piedade
ALUNO(A)	Gonçalo Gilberto

TÍTULO:	Electrochemical Strategies to Synthesize Hypervalent Iodine and Sulfur Compounds
RESUMO:	Organic electrosynthesis offers a sustainable and efficient approach to chemical transformations by utilizing electricity as a clean and renewable energy source. This project aims to investigate the use of organic electrosynthesis for the synthesis of 1) hypervalent iodine (III) reagents and 2) sulfonyl compounds. Within this project we will study the mechanistic aspects and optimization strategies involved in the anodic oxidation of iodine and sulfur compounds, exploring the potential for selective and high-yield synthesis of valuable intermediates in organic synthesis. By harnessing the power of electrochemistry, this research seeks to contribute to the development of greener synthetic methodologies with broad applicability in pharmaceuticals, materials science, and agrochemicals, addressing the growing demand for sustainable chemical processes.
LOCAL DE TRABALHO:	FCUL (8.5.40) and Faculty of Engineering and Science, School of Science, University of Greenwich
ORIENTADOR(S):	Jaime A. S. Coelho (jaimeacoelho@edu.ulisboa.pt) Kevin Lam (k.lam@greenwich.ac.uk)
ALUNO(A):	Daniel Filipe Fernandes de Carvalho

TÍTULO:	Estudo sobre as causas e estratégias de conservação para a delaminação precoce da camada de verniz em Pintura a óleo
RESUMO:	<p>Esta investigação aborda o problema da delaminação ou “pelling” precoce do verniz em pinturas a óleo e o seu impacto na conservação das obras de arte, destacando a importância de compreender as suas causas e possíveis soluções no âmbito da criação artística e da conservação e restauro.</p> <p>Inicialmente, é realizada uma breve revisão das práticas de envernizamento na pintura a óleo tradicional, bem como da evolução dos materiais e técnicas de aplicação do verniz ao longo do tempo, incluindo casos práticos desta problemática observados e documentados em pintura de cavalete.</p> <p>As causas de delaminação da camada de verniz são exploradas, analisando fatores ambientais como a presença de água, as flutuações da humidade relativa e da temperatura e a exposição à luz, assim como fatores materiais, como a composição do verniz, a compatibilidade com as camadas de tinta subjacentes e os métodos de aplicação. Para analisar estes fatores serão preparadas maquetas que serão sujeitas a envelhecimento acelerado numa câmara climática. Posteriormente, serão realizadas análises das maquetas, utilizando técnicas analíticas como a <u>Microscopia Óptica e Microscopia Eletrónica de Varrimento</u> (estrutura e morfologia das camadas e qualquer evidência de delaminação ou deterioração), a <u>Espectroscopia de Infravermelho por Transformada de Fourier</u> (FTIR) e a <u>Espectroscopia Raman</u> (informações sobre os componentes moleculares presentes no verniz e nas camadas de tinta), a <u>Cromatografia Líquida de Alta Performance</u> (HPLC) (para análise detalhada da composição química dos vernizes/outros materiais). O objetivo é compreender as interações entre as camadas dos vernizes testados e as tintas subjacentes.</p> <p>Além das maquetas, pretende-se analisar um a dois casos reais de artistas da Faculdade de Belas-Artes da Universidade de Lisboa.</p> <p>Compreendidos os motivos que podem levar à delaminação precoce da camada de verniz, são propostos métodos ou materiais para prevenir ou mitigar esta problemática, enfatizando a importância da colaboração interdisciplinar entre conservadores-restauradores, químicos e artistas para enfrentar desafios complexos de conservação.</p>
LOCAL DE TRABALHO:	FBAUL: Preparação de Maquetas; uso da câmara climática FCUL: Técnicas analíticas
ORIENTADOR(S):	Ana Bailão (FBAUL)
ALUNO(A)	Rita Santos

TÍTULO:	Síntese e Caracterização de Catinonas e Metabolitos Tóxicos
RESUMO:	<p>As catinonas sintéticas representam uma das maiores classes de novas substâncias psicoativas (NSP) reportadas em todo o mundo e constituem um sério risco à saúde pública. Desta forma, 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. No entanto, um dos maiores desafios criados pela rápida disseminação destas NSP 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 catinonas, é urgente a elucidação dos mecanismos subjacentes a estas reações adversas, para o desenvolvimento de medidas terapêuticas adequadas.</p> <p>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) selecionar quais as catinonas e respetivos metabolitos a estudar com base nos compostos que já foram encontrados no mercado de substâncias recreativas; ii) sintetizar as catinonas e o respetivos metabolitos selecionados com base na informação existente na literatura; iii) caracterizar os compostos sintetizados por diversas técnicas analíticas: espectroscopia de ressonância magnética nuclear (NMR), cromatográfica gasosa acoplada à espectrometria de massa (GC-MS), cromatografia líquida de alta eficiência com um detetor de rede de díodos (HPLC-DAD) e espectrometria de massa de alta resolução (HRMS); iv) determinar, por HRMS, o perfil metabólico (resultante de incubações <i>in vitro</i> em microssomas hepáticos cerebrais humanos) dos compostos selecionadas;</p>
LOCAL DE TRABALHO:	Laboratórios do BioISI-Ciências-ULisboa e CQE-Técnico-ULisboa
ORIENTADOR(S):	<p>Helena Gaspar (BioISI-Ciências-ULisboa) ORCID: 0000-0002-1613-7023, hmgaspar@ciencias.ulisboa.pt</p> <p>Alexandra Antunes (CQE-Técnico-ULisboa) ORCID: 0000-0003-1827-7369, alexandra.antunes@tecnico.ulisboa.pt</p>
ALUNO(A)	Carlota Ferreira

TÍTULO:	Desenvolvimento de metodologia analítica para monitorizar níveis de contaminantes prioritários em matrizes aquosas
RESUMO:	<p>O presente projeto de dissertação visa o desenvolvimento de métodos analíticos alternativos para determinação vestigial de compostos emergentes com elevado impacto em matrizes aquosas (ex. águas superficiais), recorrendo às inovadoras técnicas de microextração passiva seguida de análise por cromatografia líquida de alta eficiência (HPLC) ou cromatografia em fase gasosa (GC).</p> <p>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 micropoluentes criteriosamente selecionados. Para além da avaliação previamente estabelecida, a otimização e validação da metodologia desenvolvida, assim como a subsequente monitorização dos compostos em amostras de água estuarina serão igualmente o foco deste projeto.</p>  <p>Figura 1. Técnica de microextração adsortiva em barra (BAμE)</p> <p>O presente projeto, no âmbito da Química Analítica, proporcionará ao estudante a oportunidade de aprender a desenvolver e validar metodologias analíticas a fim de determinar níveis vestigiais de compostos farmacêuticos com impacto em matrizes ambientais, o que permitirá o contacto com metodologias inovadoras de enriquecimento prévio à análise cromatográfica.</p>
LOCAL DE TRABALHO:	FCUL; Lab. 8.2.48
ORIENTADOR(S):	JMF Nogueira; jmnogueira@ciencias.ulisboa.pt
ALUNO(A)	Bruno Rocha Quintelas

TÍTULO:	Síntese e caracterização de Nitzenos por diversas Técnicas Analíticas
RESUMO:	<p>As novas substâncias psicoativas (NSP) constituem um sério risco à saúde pública. Em 2019, surgiu uma nova classe de NSP, os nitzenos, opioides sintéticos que são análogos do 2-benzilbenzimidazole. O aumento do número de intoxicações agudas e mortes associadas ao consumo deste novo grupo NSP resultou na inclusão de vários nitzenos na Convenção da Nações Unidas sobre estupefacientes, como por exemplo, o butonitzeno, uma nova droga sintética incluída nesta convecção em março de 2024. No entanto, um dos maiores desafios criados pela rápida disseminação destas NSP no mercado de drogas ilícitas é a falta de padrões analíticos e 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.</p> <p>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) selecionar quais os nitzenos a estudar com base nos compostos que já foram encontrados no mercado de substâncias recreativas; ii) sintetizar os nitzenos e os seus metabolitos mais relevantes com base nos estudos existentes na literatura; iii) caracterizar compostos obtidos por diversas técnicas analíticas: espectroscopia de ressonância magnética nuclear (NMR), cromatográfica gasosa acoplada à espectrometria de massa (GC-MS), cromatografia líquida de alta eficiência com um detetor de rede de díodos (HPLC-DAD) e espectrometria de massa de alta resolução (HRMS); iv) determinar por espectrometria de massa de alta resolução, o perfil metabólico (resultante de incubações <i>in vitro</i> em microssomas hepáticos cerebrais humanos) dos nitzenos e metabolitos mais relevantes.</p>
LOCAL DE TRABALHO:	Laboratórios do BioISI-Ciências-ULisboa e CQE-Técnico-ULisboa
ORIENTADOR(S):	<p>Helena Gaspar (BioISI-Ciências-ULisboa) ORCID: 0000-0002-1613-7023, hmgaspar@ciencias.ulisboa.pt</p> <p>Alexandra Antunes (CQE-Técnico-ULisboa) ORCID: 0000-0003-1827-7369, alexandra.antunes@tecnico.ulisboa.pt</p>
ALUNO(A)	Inês Bento

TÍTULO:	Co-polímeros flexíveis para baterias de íão sódio e supercondensadores
RESUMO:	<p>A substituição de baterias de íão lítio por baterias de íão sódio é um processo inevitável, dada a escassez natural desse metal e a difícil e dispendiosa reciclagem das baterias de lítio. A primeira abordagem consistiu simplesmente em trocar o metal alcalino e usar a mesma tecnologia, já amadurecida, empregue nas baterias de íões lítio. No entanto, essa mudança de paradigma não se mostrou adequada porque os cátodos desenvolvidos para estas últimas, são bastante rígidos e têm dificuldade em acomodar um íão maior, como o sódio. A utilização de polímeros condutores, como o poli(3,4-etilenodioxitiofeno), PEDOT, dopado com o polianião poli(4-estirenosulfonato), PSS, já demonstrou a sua capacidade de incorporar grandes quantidades de íões sódio durante a redução (processo de descarga da bateria) e a quantitativa expulsão na oxidação (no carregamento), exibindo um comportamento redox pseudo-catiónico. Nesta proposta de dissertação de mestrado, explorar-se-à uma nova abordagem, ao eletropolimerizar conjuntamente EDOT com catecolaminas (por ex. dopamina, epinefrina) para formar co-polímeros com propriedades condutoras e pseudo-capacitivas, conferidas pelo PEDOT, e adesivas, atribuídas às policatecolaminas. O processo redox dos grupos catecol presentes no co-polímero, pode facilitar o armazenamento de íão sódio nestes materiais poliméricos intrinsecamente flexíveis, aumentando o carácter pseudo-catiónico das matrizes poliméricas, durante os fenómenos de transferência de carga. A combinação destes materiais poliméricos com nanomateriais carbonáceos com elevada apetência para o íão sódio, pode torná-los também especialmente atrativos para o desenvolvimento de supercondensadores.</p> <p>Este trabalho permitirá ao estudante desenvolver competências em várias áreas, nomeadamente em eletroquímica, funcionalização e caracterização de superfícies e conversão e armazenamento de energia.</p>
LOCAL DE TRABALHO:	Lab. 8.3.46/47/62
ORIENTADOR(S):	Ana Viana e Jorge Correia
ALUNO(A)	Katherine Bettencourt

TÍTULO:	Desenvolvimento da arquitetura de células eletroquímicas de leito fluidizado para desionização capacitiva
RESUMO:	<p>O design de células eletroquímicas é uma área em constante evolução uma vez que este tipo de sistemas tem aplicações em variadíssimas áreas desde a produção e armazenamento de energia aos processos de dessalinização por desionização capacitiva [1]. Dentro das várias configurações de células eletroquímicas as de leito fluidizado (fluxo) têm sido apresentadas como promissoras face às tradicionais células com eléctrodos estáticos. Uma das vantagens prende-se com o facto de que os eléctrodos fluidizados permitirem trabalhar com maior quantidade de material ativo do que os eléctrodos estáticos, aumentando drasticamente a eficiência em processos eletroquímicos em que se forma uma dupla camada eléctrica.</p> <p>O presente tema para dissertação de mestrado centra-se no desenvolvimento de células eletroquímicas de leito fluidizado com configuração em 3 canais, que de acordo com a literatura, pode permitir ultrapassar a maior limitação dos processos de dessalinização de água do mar por desionização capacitiva. Para além do desenvolvimento da arquitetura da célula também se pretende avaliar o potencial de coletores de corrente de espuma de níquel tridimensionais (3D) [2]. O sistema será testado utilizando como eléctrodo fluidizado um material de carbono nanoporoso comercial e uma solução salina de NaCl.</p> <p>Ao desenvolver competências no design de células eletroquímicas de leito fluidizado o aluno terá oportunidade de se familiarizar com os vários componentes que constituem este tipo de célula (coletores, membranas, espaçadores) assim como com os materiais de carbono nanoporosos, que serão testados como eléctrodo fluidizado, e seus métodos de caracterização.</p> <p>Referências</p> <p>[1] K. Sun, M. Tebyetekerwa, C. Wang, X. Wang, X. Zhang, X. S. Zhao (2023). Electrocapacitive Deionization: Mechanisms, Electrodes, and Cell Designs. <i>Advanced Functional Materials</i>, 33(18), Article 2213578. https://doi.org/10.1002/adfm.202213578</p> <p>[2] X. Zhang, H. Zhou, Z. He, H. Zhang, H. Zhao, H. (2022). Flow-electrode capacitive deionization utilizing three-dimensional foam current collector for real seawater desalination. <i>Water Research</i>, 220, 118642. https://doi.org/10.1016/j.watres.2022.118642</p>
LOCAL DE TRABALHO:	Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Dep. Química e Bioquímica (DQB, Lab. 8.3.60) e Departamento de Engenharia Geográfica, Geofísica e Energia (DEGGE, Lab 8.4.07)
ORIENTADOR(S):	Ana Sofia Mestre (DQB) e Killian Lobato (DEGGE)
ALUNO(A)	Eduardo Pais

TÍTULO:	Síntese e caracterização de co-cristais com interesse para a indústria farmacêutica
	<p>A eficácia de um medicamento é fortemente influenciada pela natureza e propriedades físicas da forma cristalina do princípio ativo (API) utilizado na formulação farmacêutica. Estima-se, por exemplo, que 70-90% dos APIs desenvolvidos pela indústria farmacêutica possuem uma solubilidade em água demasiado baixa para atingirem os fins terapêuticos.</p> <p>A síntese de co-cristais, isto é, formas cristalinas constituídas pelo API e uma ou mais moléculas biocompatíveis é, presentemente, uma das estratégias mais atraentes para desenvolver novos medicamentos, ou melhorar as propriedades de medicamentos já existentes. Há, por isso, um enorme investimento da indústria farmacêutica nesta área, devido às oportunidades criadas em termos de inovação e novas patentes. Esse interesse está refletido por seis medicamentos baseados em co-cristais recentemente aprovados pela Food and Drug Administration (FDA).</p> <p>O presente projeto tem por objetivos: (i) a obtenção de co-cristais de princípios ativos farmacêuticos com vista a obter formas cristalinas com propriedades mais vantajosas para uso terapêutico (e.g. maior solubilidade, maior pureza, maior estabilidade) do que as do API puro; (ii) a sua caracterização em termos estruturais e de estabilidade térmica; e (iii) o estudo da sua solubilidade relativamente à do API puro.</p> <p>O trabalho será focado em derivados do ácido fumárico, como o monometil fumarato ou o dimetil fumarato, utilizados, por exemplo, no tratamento da psoríase e da esclerose múltipla.</p> <p>O plano de trabalhos envolve essencialmente as seguintes tarefas, que se baseiam em procedimentos experimentais bem estabelecidos no nosso laboratório:</p> <p><u>Síntese de co-cristais por mecanoquímica.</u> A mecanoquímica é um método de síntese muito simples e rápido. Tem a vantagem de ser um processo verde, uma vez que evita o uso de solventes. No âmbito deste projeto, consiste simplesmente na moagem de misturas estequiométricas de um API e de um co-formador num moinho de bolas, durante tempos pré-estabelecidos que, geralmente, não ultrapassam 1h. A verificação do sucesso na produção do co-cristal pode ser realizada comparando difratogramas de pós ou, termogramas obtidos por calorimetria diferencial de varrimento, do produto obtido e dos compostos de partida. Nos casos em que a síntese tiver sucesso, tentar-se-á também produzir co-cristais por cristalização a partir de solução. Esta técnica é mais favorável do que a mecanoquímica para produzir cristais com dimensões adequadas à determinação da estrutura cristalina por difração de raios-X de cristal único e para efeitos de “scale-up”.</p> <p>2. <u>Caracterização.</u> A caracterização estrutural será realizada essencialmente por métodos de difração de raios-X, em colaboração com o grupo de cristalografia do Centro de Química Estrutural. A estabilidade térmica será avaliada por calorimetria diferencial de varrimento, termogravimetria, calorimetria Calvet e calorimetria de solução.</p> <p>3. <u>Medidas de solubilidade.</u> As solubilidades do co-cristal (AB) e dos seus componentes individuais (A e B) serão obtidas analisando a composição de soluções saturadas de A, B e AB. O trabalho será realizado por medidas dinâmicas, usando um reator, desenvolvido no grupo e/ou pelo método do resíduo sólido</p>
LOCAL DE TRABALHO:	FCUL, labs 8.3.49 e 8.3.53
ORIENTADOR(S):	Manuel Minas da Piedade (memp@fc.ul.pt); Ricardo Simões (rasimoes@fc.ul.pt)
ALUNO(A):	Ricardo Mané

TÍTULO:	An In Silico Protocol to Evaluate and Optimize Cyclodextrins for Drug Delivery
RESUMO:	<p>Pharmacokinetics plays a significant role in the pharmacological effect of drugs and exploring delivery systems with such properties improved is paramount for drug development. In this scope, cyclodextrins (CDs) are a group of cyclic oligosaccharides containing a hydrophilic outer surface and a lipophilic central cavity which can form inclusion complexes with several drugs, often improving their aqueous solubility, thus, being suitable vehicles for drug delivery¹. The accurate, yet fast, estimation of the binding energy of a given CD:drug complex could boost the development of more efficient drug delivery systems allowing to discriminate, a priori, the suitability of a given host:guest pair for therapeutical applications.</p> <p>In this work, a combination of computational methods such as Quantum Mechanical Calculations (QM), Molecular Docking, and Molecular Dynamics (MD) simulations will be used to build a pipeline for the estimation of CD:drug binding energies. The results obtained from these methods will be validated and/or fitted against experimental data². From there, the final goal is to use features extracted from the above-mentioned computational techniques along with Machine Learning and Artificial Intelligence methods to develop a fast and efficient model capable of predicting the binding affinities of a given compound to a series of cyclodextrin hosts.</p> <p>References</p> <p>1. Tiwari, G., Tiwari, R. & Rai, A. Cyclodextrins in delivery systems: Applications. <i>J. Pharm. Bioallied Sci.</i> 2, 72 (2010).</p> <p>2. Loftsson, T., Hreinsdóttir, D. & Másson, M. The complexation efficiency. in <i>Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry</i> vol. 57 545–552 (Springer, 2007).</p>
LOCAL DE TRABALHO:	BioISI, Computational Biophysics Lab and Computational Chemistry & Molecular Interactions Lab (8.5.50D)
ORIENTADOR(S):	Miguel Machuqueiro (machuque@ciencias.ulisboa.pt), Paulo J. Costa (pjcosta@ciencias.ulisboa.pt)
ALUNO(A)	Francisco Pedro Esteves Duarte

TÍTULO:	Ruthenium compounds that revert multidrug resistance in cancer therapy
RESUMO:	<p>One of the major limitations to the efficacy of drugs in clinical use for the treatment of cancer is the frequent development of multidrug resistance (MDR), which results in complete treatment failure and lack of therapeutic options. One of the main mechanisms of MDR is the enhanced action of membrane transport proteins, such as P-gp and MRP1. These efflux pumps are overexpressed in several types of cancer cells to push drugs out and hamper their therapeutic effect.</p> <p>The BIOIN-CQE Research Group has been developing ruthenium organometallic compounds that target these exporters and address this critical limitation in chemotherapy. Previous results identified within this family of metallodrug candidates the best P-gp inhibitor ever reported[1], and that these compounds are cisplatin sensitizers in resistant lung cancer cell lines[2], making them responsive to treatment again. In addition, some compounds showed remarkable activity on their own as cytotoxic agents against lung cancer.</p> <p>Objectives: Within this multidisciplinary M.Sc. proposal, we will use specific ligands endowed with different MDR abilities to expand the activity of this family of ruthenium compounds.</p> <p>Working Plan: This project offers excellent formation in chemical synthesis (and compounds purification) using <i>Schlenk</i> techniques, together with several characterization tools (e.g. FTIR, NMR, UV-Vis., MS) providing the student with essential skills in product development in the Pharmaceuticals field. The work planned is divided into the following steps:</p> <p>i) Synthesis and purification of new organometallic compounds;</p> <p>ii) Characterization of the new compounds by the usual spectroscopic techniques, elemental analysis and X-ray diffraction whenever possible, among others;</p> <p>iii) Preliminary evaluation of their chemical/physicochemical features (stability, reactivity in relevant biological media)</p> <p>iv) Evaluation of the anticancer potential of the new compounds as MDR revertants (in the frame of ongoing collaborations).</p> <p>References</p> <p>[1] L. Côte-Real et al. Eur. J. Med. Chem., 2019, 10.1016/j.ejmech.2018.12.022</p> <p>[2] R. Teixeira et al. Inorg. Chem. Front., 2021, 10.1039/D0QI01344G</p>
LOCAL DE TRABALHO:	Laboratório de Química Organometálica (8.5.46), 5º piso C8, FCUL, Campo Grande, Lisboa.
ORIENTADOR(S):	Andreia Valente
ALUNO(A)	Daniela Lino

TÍTULO:	LDH-MoS₂ como catalisador de hidrogenação de compostos nitroaromáticos
RESUMO:	<p>Os compostos orgânicos aromáticos são reconhecidos por serem muito importantes em inúmeras áreas da química tanto industrial como de investigação. A hidrogenação catalítica apesar de ser muitas vezes usada a nível industrial apresenta baixa seletividade (pois é muito suscetível à presença ligações duplas C=C), requer temperaturas elevadas e os catalisadores tipicamente utilizados neste tipo de reação são metais nobres, geralmente platina ou paládio[1]. As argilas do tipo hidróxido duplo lamelar (HDL) são uns dos materiais inorgânicos conhecidos que têm sido alvo de um elevado desenvolvimento nos últimos anos, devido às suas aplicações em catálise heterogénea. A versatilidade desses materiais depende não só da capacidade de permuta iónica, mas também da sua composição. O MoS₂ tem uma estrutura que é especialmente interessante devido às suas ligações fracas interplanares sendo muito usado e estudado como catalisador em processos de redução. A utilização destes materiais apresenta-se como vantajosa uma vez que são facilmente acessíveis e podem ser preparados em grandes quantidades sem comprometer a qualidade. O principal objetivo deste trabalho será a preparação de um material HDL usando Co e Al, e a sua utilização como suporte de MoS₂ (também preparado no âmbito desta dissertação) obtendo-se um material híbrido HDL(Co/Al)-MoS₂, para ser testado como catalisador seletivo na hidrogenação de compostos nitro. Os substratos estudados serão compostos aromáticos com um grupo substituinte nitro (4-nitroanilina, 4-cloro nitrobenzeno, 4-metilnitrobenzoato, 3-nitrofenol e 4-nitrofenol) [2].</p> <p>Os nanomateriais serão caracterizados através de difração de raios-X de pó (DRX), espectroscopia de infravermelho (DRIFT) e microscopia eletrónica de varrimento (SEM).</p> <p>As reações catalíticas irão ser realizadas para se otimizarem diferentes parâmetros – temperatura, quantidade de catalisador e de redutor – de forma a serem obtidos os resultados mais promissores.</p> <p>As reações serão seguidas por espectrofotometria de UV-Vis, de forma a otimizar a reação e a cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massa (GC-MS) será usada para analisar e quantificar o(s) produto(s) final(ais).</p> <p>Referências [1] C. Nethravathi, J. Prabhu, S. LakshmiPriya, M. Rajamathi, ACS Omega, 2017, 2, 5891-5897. [2] B. Raimundo, D. Kino, N. Kitgawa, Y. Tokudome, C.D. Nunes, App. Clay Sci., 2023, 239, 106948.</p>
LOCAL DE TRABALHO:	8.5.42
ORIENTADOR(S):	Carla D. Nunes
ALUNO(A)	Miguel Gameiro

TÍTULO:	Desenvolvimento de novos nanomateriais foto-ativos contendo C-dots para aplicações sustentáveis
RESUMO:	<p>Dos 17 objetivos propostos pelas Nações Unidas, para um desenvolvimento sustentável, é dada especial relevância à necessidade da produção de bens e produtos decorrerem da utilização de matérias-primas renováveis, da reciclagem de produtos e da utilização de fontes de energia renováveis ou naturais.</p> <p>Particular preocupação é também dada aos efeitos do aumento da radiação UV que atinge a Terra, devido às alterações climáticas. Estes fenómenos impulsionam novos desafios, nomeadamente ao desenvolvimento de materiais que permitam uma proteção eficaz e adequada.</p> <p>Esta proposta de trabalho insere-se nesta temática, ao pretender explorar a utilização de novos materiais híbridos como barreira protetora para eliminar os efeitos nefastos da foto-oxidação de matéria orgânica, por exposição a radiação UV.</p> <p>Para o efeito, será estuda a síntese de novos materiais híbridos, incluindo nanotubos de titanato (TNTs), modificados por incorporação de pontos de carbono (<i>carbon-dots</i>, C-dots).</p> <p>Pensando no impacto em termos de sustentabilidade e economia circular, a produção dos C-dots terá por base biomassa proveniente do tratamento de algas da costa portuguesa (trabalho em colaboração).</p> <p>Experimentalmente será realizado o estudo do impacto das condições experimentais nas propriedades finais dos nanomateriais preparados. Depois de convenientemente caracterizadas, nomeadamente do ponto de vista fotocatalítico, as amostras mais promissoras serão avaliadas como futuros filtros de radiação UV.</p>
LOCAL DE TRABALHO:	8.3.47; 8.3.62; 8.3.60
ORIENTADOR(S):	Olinda C. Monteiro e Ana Sofia Mestre
ALUNO(A)	Malena Schweiker

TÍTULO:	Avaliação da performance fotocatalítica e antimicrobiana de novos nanomateriais híbridos de nanotubos de titanatos e $g\text{-C}_3\text{N}_4$
RESUMO:	<p>A síntese de nanomateriais híbridos tem sido um dos métodos mais utilizados para controlar as propriedades das partículas. Através da combinação sinérgica de dois ou mais componentes é possível obter materiais com funcionalidades melhoradas para aplicações inovadoras. Esta proposta de trabalho segue esta linha de investigação, propondo-se avaliar as propriedades fotocatalíticas dos nanotubos de titanato quando combinados com o também foto-ativo $g\text{-C}_3\text{N}_4$. Simultaneamente pretendem-se explorar as propriedades antimicrobianas destes novos nanomateriais e assim avaliar a possibilidade de poderem ser usados em novas aplicações.</p> <p>Para o efeito, será estuda a síntese de novos materiais híbridos, incluindo nanotubos de titanato (TNTs), modificados por incorporação nitreto de carbono nanocristalins ($g\text{-C}_3\text{N}_4$). A atividade fotocatalítica e as propriedades antimicrobianas serão estudadas usando condições modelo.</p> <p>Experimentalmente será estudo o impacto das condições experimentais nas propriedades finais dos nanomateriais preparados. Este estudo incluirá a síntese das amostras usando metodologias <i>one-pot</i> e <i>step-by-step</i>. Depois de convenientemente caracterizadas, nomeadamente do ponto de vista fotocatalítico, as amostras mais promissoras serão avaliadas para futuras aplicações usando radiação visível.</p>
LOCAL DE TRABALHO:	8.3.47; 8.3.62
ORIENTADOR(S):	Olinda C. Monteiro
ALUNO(A)	Ana Carolina Morais

TÍTULO:	Electrochemical Oxidative Lactonization
RESUMO:	<p>Lactones are biologically important scaffolds that serve as crucial building blocks in medicinal chemistry. Phthalides, in particular, are bicyclic compounds characterized by the fusion of a γ-lactone with a benzene unit. The preferred method for synthesizing lactones typically involves the metal-catalyzed C–H lactonization of free carboxylic acids. Recently, electrochemistry has emerged as a greener method for organic synthesis (electro-organic synthesis). This approach enables the exploration of new modes of reactivity while avoiding toxic oxidants and expensive catalysts, making reactions more environmentally friendly.</p> <p>This project proposes an innovative and mechanistically different approach to synthesizing phthalides by exploring the lactonization of o-alkylphenyl ketones using electro-organic synthesis. The practical utility of this novel methodology will be demonstrated through the late-stage lactonization of agrochemical active ingredients, specifically focusing on metrafenone (collaboration with Ascenza Agro).</p>
LOCAL DE TRABALHO:	FCUL (8.5.40)
ORIENTADOR(S):	Jaime A. S. Coelho (jaimeacoelho@edu.ulisboa.pt)
ALUNO(A):	Carolina Catarino