

Projeto Tecnológico 2024-2025 – Licenciatura em Química Tecnológica

Aluno	Projeto	Orientador(es)
	PT1- Desenvolvimento de estruturas porosas 3D para deteção avançada de armas químicas	Paulo Martinho pnmartinho@ciencias.ulisboa.pt
	PT2- Estudo das propriedades de co-cristais de hexametilenotetramina com halofenóis	Carlos Bernardes cebernardes@ciencias.ulisboa.pt
	PT3- Estabilidade e polimorfismo de co-cristais de cafeína com ácido maleico	Manuel Minas da Piedade mepiedade@ciencias.ulisboa.pt Ricardo Simões rasimoes@ciencias.ulisboa.pt
	PT4- Otimização de parâmetros na deposição de MOFs por deposição eletroforética	Sara Realista smrealista@ciencias.ulisboa.pt
	PT5- Valorização de biomoléculas de resíduos biológicos após extração com líquidos iónicos	Rita Pacheco ripacheco@ciencias.ulisboa.pt Maria José Lourenço mjlourenco@ciencias.ulisboa.pt
	PT6- Avaliação do efeito barreira em sensores térmicos com sais fundidos e nanosais. Caso de estudo: temperatura, condutibilidade térmica e/ou viscosidade	Maria José Lourenço mjlourenco@ciencias.ulisboa.pt
	PT7- Métodos alternativos de preparação de sais fundidos dopados com nanomateriais: Investigação e limites operacionais em centrais solares térmicas	Maria José Lourenço mjlourenco@ciencias.ulisboa.pt
	PT8- Descoberta de novos parâmetros de líquidos iónicos e suas misturas aquosas para fluidos de transferência e armazenamento de calor. Caso I: Viscosidade e condutibilidade elétrica	Carlos Nieto de Castro cacastro@ciencias.ulisboa.pt (apoio: Fernando Caetano e Maria José Lourenço)

	PT9- Descoberta de novos parâmetros de líquidos iónicos e suas misturas aquosas para fluidos de transferência e armazenamento de calor. Caso II: índice de refração e toxicidade	Carlos Nieto de Castro cacastro@ciencias.ulisboa.pt (apoio: Rita Pacheco e Maria José Lourenço)
	PT10- Desenvolvimento de revestimentos anti-incrustantes com nanopartículas derivadas de produtos naturais.	Rita Pacheco ripacheco@ciencias.ulisboa.pt Elisabete Silva ersilva@ciencias.ulisboa.pt
	PT11- Revestimentos para betão: 10 anos de luta contra reações químicas expansivas	Ana Cristino afcristino@ciencias.ulisboa.pt Maria Estrela Jorge mdjorge@ciencias.ulisboa.pt
	PT12- Desenvolvimento de novos biocidas para o controlo sustentável do nemátode da madeira do pinheiro	Cristina Moiteiro cmmoiteiro@ciencias.ulisboa.pt Ana Isabel Janeiro aianeiro@ciencias.ulisboa.pt
Sónia Sun	PT13- Estudo de materiais porosos metal-orgânicos como potenciais veículos para o armazenamento e libertação de NO e de H ₂ S em concentrações terapêuticas	João Silva jpsilva@ciencias.ulisboa.pt
Diana Tkachuk	PT14- Design de novas superfícies fotocatalíticas para a degradação de poluentes	Virginia Ferreira vcferreira@fc.ul.pt Olinda Monteiro ocmonteiro@ciencias.ulisboa.pt
	PT15- Avaliação da variação do teor de sulfureto de hidrogénio com a profundidade da água de barragens	Ricardo Bettencourt rjsilva@fc.ul.pt Cristina Oliveira cmoliveira@ciencias.ulisboa.pt
Tomás Matoso	PT16- Cristalização de compostos orgânicos com interesse em indústrias de química fina: os passos iniciais da sua formação a partir de solução	Manuel Minas da Piedade mepiedade@ciencias.ulisboa.pt Maria da Soledade Santos mssantos@ciencias.ulisboa.pt

Filipa Oliveira	PT17- Montagem e teste de instrumento de Dispersão Dinâmica da Luz (DLS -Dynamic Light Scattering) para caracterização de sistemas heterogéneos de dispersões de nanopartículas em líquidos (nanofluidos).	Manuel Matos Lopes matoslopes@ciencias.ulisboa.pt
Joana Vilela	PT18- Identificação de novas substâncias psicoativas	Helena Gaspar hmgaspar@ciencias.ulisboa.pt
	PT19- Dessulfurização oxidativa de moléculas modelo catalisada por nanocatalisadores de molibdénio	Carla Nunes cmnunes@fc.ul.pt
	P20- Avaliação do impacto de alguns parâmetros experimentais nas propriedades de fotocatalisadores nanocristalinos	Virginia Ferreira vcferreira@fc.ul.pt Olinda Monteiro ocmonteiro@ciencias.ulisboa.pt
	P21- Desenvolvimento de materiais piezoelétricos com transição de spin para conversão de energia mecânica em elétrica	Paulo Martinho pnmartinho@ciencias.ulisboa.pt Mário Rodrigues mmrodrigues@ciencias.ulisboa.pt
	P22- Regeneração térmica de carvões ativados granulares saturados com compostos farmacêuticos	Ana Paula Carvalho ana.carvalho@ciencias.ulisboa.pt
	P23 - Design de novos compostos de Cu para a terapia do cancro	Tânia Morais tsmorais@fc.ul.pt
	P24 - Carvões ativados obtidos a partir de macroalgas para remoção de compostos farmacêuticos	Ana Sofia Mestre asmestre@ciencias.ulisboa.pt
	P25- Caracterização solvatocrómica e modelação da mistura ternária água-etanol-N-formilmorfolina	Filomena Martins filomena.martins@ciencias.ulisboa.pt Luís Moreira luis.moreira@iseclisboa.pt
	P26- Síntese e incorporação de nanopartículas metálicas em filmes poliméricos para o desenvolvimento de biossensores eletroquímicos e óticos	Ana Viana anaviana@fc.ul.pt

PT1

Desenvolvimento de estruturas porosas 3D para detecção avançada de armas químicas

Introdução: Armas químicas representam uma séria ameaça global devido à sua capacidade de causar danos massivos em curtos períodos de tempo e com pequenas quantidades de agentes tóxicos. A rápida detecção e identificação destes agentes tóxicos são essenciais para a segurança e defesa nacional e internacional. Materiais porosos, especialmente aqueles com estruturas organizadas em três dimensões, oferecem uma plataforma promissora para a adsorção e detecção de moléculas específicas devido à sua alta área superficial e capacidade de terem respostas ao nível das suas propriedades eletrônicas, como magnéticas.

Objetivos: O objetivo principal deste projeto é preparar materiais porosos inovadores capazes de detetar eficientemente moléculas que são utilizadas como armas químicas. Especificamente, o projeto visa:

- 1) Sintetizar estruturas porosas 3D com características ajustáveis, como tamanho de poro, volume de poro, e superfície específica.
- 2) Analisar as propriedades eletrônicas e magnéticas dos novos materiais preparados.
- 3) Avaliar a capacidade de detecção destes materiais em condições controladas de laboratório.

Testes de Detecção: Os materiais serão testados quanto à sua eficácia na adsorção e detecção de simuladores de agentes de guerra química em um ambiente controlado. A detecção será monitorada utilizando técnicas como espectroscopia de UV-vis e magnetometria de SQUID.

Resultados Esperados: Espera-se desenvolver um material poroso com alta sensibilidade e seletividade para agentes de guerra química, contribuindo assim para a segurança nacional e internacional.

PT2

Estudo das propriedades de co-cristais de hexametenotetramina com halofenóis

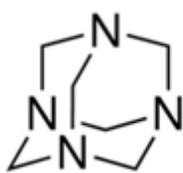
Uma das estratégias mais exploradas atualmente para a criação de novos sólidos funcionais é a co-cristalização, isto é, a formação de compostos cristalinos, constituídos por dois ou mais tipos de moléculas (os chamados co-cristais). Este facto confere-lhes propriedades únicas que podem ser exploradas, por exemplo, na formulação de corantes, agroquímicos, compostos energéticos e medicamentos. É aliás nesta última área que, a síntese de co-cristais tem encontrado maior aplicação.

Um aspeto crítico quando se pretende controlar forças intermoleculares é o conhecimento das preferências de interação dos diferentes tipos de grupos que constituem uma molécula, quando confrontados com vários parceiros possíveis (co-formadores). Tal conhecimento pode ser usado para selecionar os parceiros mais adequados para gerar um arranjo das moléculas na rede cristalina capaz de conferir ao cristal as propriedades desejadas.

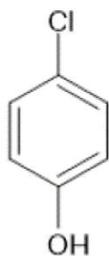
As ligações de halogénio são uma das mais recentes adições ao conjunto de “forças” intermoleculares que podem ser utilizadas para a produção e manipulação de arranjos supramoleculares em cristais. Estas correspondem a um tipo de ligação intermolecular, p.e. $C-X\cdots N$, onde um átomo de halogénio, ($X = Cl, Br$ ou I), funciona como aceitador de carga de um doador (neste caso N). Considerando que muitos ingredientes farmacêuticos são constituídos por moléculas halogenadas, então, estudos em materiais que envolvam este tipo de interações são particularmente interessantes para a indústria farmacêutica.

Para estes estudos serão considerados co-cristais formados por Hexametenotetramina e 4-clorofenol, 4-bromofenol e 4-iodofenol (Figura 1), os quais foram recentemente produzidos pela primeira vez no Laboratório de Energética Molecular da FCUL. O presente projeto tem por objetivos: (i) sintetizar co-cristais utilizando técnicas de mecanoquímica e cristalização a partir de solução; (ii) caracterização dos produtos por técnicas como difração de raios-X, calorimetria diferencial de varrimento, termomicroscopia e medidas de solubilidade.

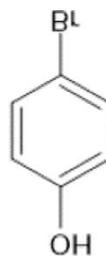
Hexametenotetramina



4-clorofenol



4-bromofenol



4-iodofenol

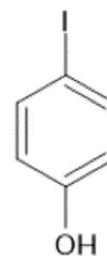


Figura 1. Estrutura molecular dos compostos a estudar neste trabalho.

PT3

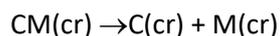
Estabilidade e polimorfismo de co-cristais de cafeína com ácido maleico

Neste projeto, será investigada a estabilidade e o polimorfismo de co-cristais de cafeína com ácido maleico, bem como a respetiva capacidade de melhorar a solubilidade da cafeína.

Os co-cristais serão preparados por dois métodos distintos: moagem mecânica (mecanoquímica) e cristalização a partir de solução. Por mecanoquímica, os dois componentes são pesados em quantidades estequiométricas, e a mistura moída, com recurso a moinho de bolas, de forma a sintetizar o co-cristal. Na co-cristalização a partir de solução, ambos os componentes são dissolvidos num solvente adequado, e a solução é arrefecida, ou o solvente deixado a evaporar, para formar os co-cristais. As condições experimentais para a formação dos co-cristais (tempo e frequência de moagem, solvente utilizado, etc.) serão testadas e otimizadas no decurso do projeto.

Os sólidos obtidos por ambos os métodos serão caracterizados por difração de raios-X, com vista a confirmar a formação dos co-cristais, determinar a sua estrutura cristalina e caracterizá-los em termos de polimorfismo. Serão também realizadas experiências de calorimetria diferencial de varrimento (DSC), para analisar o comportamento térmico das amostras, determinar o ponto de fusão, entalpia de fusão e detetar possíveis transições de fase associadas a polimorfismo.

A estabilidade dos co-cristais relativamente à sua dissociação nos precursores de acordo com:



onde CM representa o co-cristal, C é a cafeína e M o ácido maleico, será avaliada através da obtenção da energia de Gibbs do processo, com base em medidas de solubilidade. A entalpia correspondente poderá também ser determinada com recurso a microcalorimetria Calvet ou, calorimetria de solução. A conjugação dos valores de ΔG e ΔH permitirá obter o correspondente termo $T\Delta S$ e estudar se a estabilidade é controlada entalpicamente ou entropicamente.

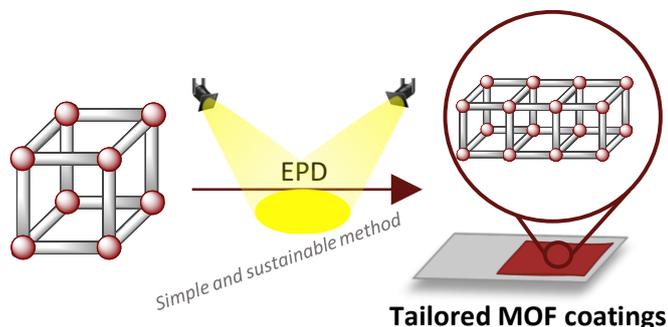
PT4

Otimização de parâmetros na deposição de MOFs por deposição eletroforética

Objetivos

1. Desenvolver competências técnicas em deposição eletroforética e caracterização de materiais, com foco na aplicação destas técnicas a estruturas metalo-orgânicas (do inglês Metal-Organic Frameworks, MOFs).
2. Investigar a influência de variáveis experimentais, como voltagem, tempo de deposição e qualidade da suspensão, na formação e nas propriedades finais dos filmes de MOFs.
3. Identificar e otimizar as condições de deposição que maximizem a qualidade e funcionalidade dos filmes, com vista a aplicações práticas em armazenamento de informação.

A deposição controlada de materiais, especialmente em escala nanoestruturada, desempenha um papel fundamental no desenvolvimento de tecnologias avançadas em áreas como eletrônica, catálise, sensores e armazenamento de energia. A deposição eletroforética destaca-se como uma técnica versátil e eficiente para criar filmes finos e uniformes de materiais, permitindo um elevado grau de controlo sobre a composição e morfologia dos mesmos. No caso das MOFs, a deposição eletroforética permite integrar esses materiais porosos e funcionalizáveis em superfícies sólidas de forma controlada, possibilitando a criação de dispositivos com propriedades otimizadas para aplicações específicas.



Durante o trabalho, será investigada a manipulação de variáveis-chave (como voltagem aplicada, tempo de deposição e qualidade da suspensão) pode impactar significativamente as propriedades dos filmes de MOFs. A otimização destas variáveis visa desenvolver um conhecimento profundo dos mecanismos que regem a deposição de materiais nanoestruturados. Este conhecimento será essencial para o controlo das características dos MOFs (adesão ao substrato, homogeneidade, morfologia, condutividade, etc), permitindo adaptar os filmes para diferentes aplicações tecnológicas. No final do projeto, espera-se que o estudante tenha adquirido competências sólidas em planeamento experimental, modulação de parâmetros de deposição eletroforética, e análise de resultados com técnicas avançadas (SEM, XRD e FTIR). Esta formação permitirá ao estudante otimizar as condições experimentais para adaptar os MOFs a aplicações práticas, preparando-o para enfrentar desafios reais e contribuir com inovações na química de materiais e tecnologias emergentes, tanto na indústria quanto na investigação científica.

PT5

Valorização de biomoléculas de resíduos biológicos após extração com líquidos iônicos

O objetivo principal deste trabalho será a identificação de biomoléculas presentes em resíduos biológicos de crustáceos, cefalópodes e cabelo humano obtidos com adição de líquidos iônicos (LI) para extração de pigmentos naturais com aplicação em tintas solares térmicas. Para além disso pretende-se avaliar o potencial de valorização das proteínas ou biomoléculas obtidas para aplicações médicas ou industriais.

O trabalho será dividido em diferentes etapas:

- a) Pesquisa bibliográfica para seleção de métodos para identificação e quantificação de proteínas e outras biomoléculas presentes nos resíduos biológicos.
- b) Quantificar as proteínas extraídas utilizando técnicas analíticas, com destaque para a determinação de proteína total pelo método de Bradford. A identificação das proteínas mais relevantes será feita por eletroforese e/ou métodos de deteção específicos, com possível quantificação de outras biomoléculas, caso estas demonstrem relevância.
- c) Avaliação da toxicidade dos líquidos iônicos com ensaios de toxicidade dos líquidos iônicos empregados, utilizando linhas celulares humanas apropriadas, de forma a determinar a segurança de uso desses solventes.

Espera-se a obtenção de dados sobre a composição dos resíduos biológicos e a eficiência dos líquidos iônicos na extração de proteínas e outras biomoléculas relevantes. As proteínas e biomoléculas isoladas serão ainda indicadas quanto ao seu potencial de valorização para outras aplicações, como na área médica e farmacêutica.

Ao longo deste projeto, o aluno adquirirá conhecimentos avançados e capacidades práticas em técnicas de quantificação e identificação de biomoléculas presentes em resíduos biológicos. O aluno também obterá experiência em ensaios de toxicidade em linhas celulares humanas, compreendendo a importância da avaliação de segurança de solventes como os líquidos iônicos.

PT6

Avaliação do efeito barreira em sensores térmicos com sais fundidos e nanosais. Caso de estudo: temperatura, condutibilidade térmica e/ou viscosidade

O plano de trabalhos consiste nos seguintes pontos:

- 1 – Análise da bibliografia existente sobre a utilização de sensores térmicos para a medição de propriedades termofísicas a temperaturas elevadas.
- 2 – Análise da compatibilidade de vários materiais cerâmicos com os sais fundidos (carbonatos de LiNaK e seus nanosais de sílica e magnésia); seleção de capas protetoras dos sensores térmicos de platina e níquel e tomada de decisão nas geometrias mais apropriadas.
- 3 – Montagem dos novos sensores, tratamento térmico e cálculo do efeito barreira no rigor da determinação da temperatura, condutibilidade térmica e/ou viscosidade.
- 4 – Determinação da condutibilidade térmica utilizando sensores de filme fino (técnica da fita aquecida em regime transiente) e/ou viscosidade (técnica do copo oscilante) dos nanosais estudados.
- 5 – Elaboração do relatório final de projeto.

PT7

Métodos alternativos de preparação de sais fundidos dopados com nanomateriais: Investigação e limites operacionais em centrais solares térmicas

O plano de trabalhos consiste nos seguintes pontos:

- 1 – Análise da bibliografia existente sobre a utilização de sais fundidos e nanosais como fluidos de transferência e armazenamento de calor a altas temperaturas
- 2 – Análise de diferentes metodologias de preparação de sais dopados com nanomateriais, de acordo com a pureza, estabilidade das suspensões e segurança. Seleção da metodologia mais adequada.
- 3 – Estudo de sistemas de carbonatos de lítio, sódio e potássio, incluindo misturas eutécticas, com nanosílica e nanomagnésia, por DSC, Raios X e TEM.
- 4 – Elaboração do relatório final de projeto

PT8

Descoberta de novos parâmetros de líquidos iônicos e suas misturas aquosas para fluidos de transferência e armazenamento de calor. Caso I: Viscosidade e condutibilidade elétrica

O plano de trabalhos consiste nos seguintes pontos:

- 1 – Análise da bibliografia publicada pelo grupo de investigação e na literatura sobre as propriedades físico-químicas dos sistemas aquosos de líquidos iônicos
- 2 – Seleção e estudo dos sistemas a estudar, com vista à compreensão das relações estrutura-propriedades
- 3 – Medição da viscosidade e condutibilidade elétrica de componentes puros e misturas aquosas
- 4 – Estudo da ionicidade dos sistemas estudados e possíveis aplicações
- 5 – Elaboração do relatório final de projeto.

PT9

Descoberta de novos parâmetros de líquidos iônicos e suas misturas aquosas para fluidos de transferência e armazenamento de calor. Caso II: Índice de refração e toxicidade

O plano de trabalhos consiste nos seguintes pontos:

- 1 – Análise da bibliografia publicada pelo grupo de investigação e na literatura sobre as propriedades físico-químicas dos sistemas aquosos de líquidos iônicos, com ênfase especial na toxicidade.
- 2 - Seleção e estudo dos sistemas a estudar, com vista à toxicidade mínima em sistemas aquosos abertos e confinados.
- 3 – Determinação do índice de refração dos sistemas selecionados e cálculo das funções de excesso.
- 4 – Determinação da cito-toxicidade dos sistemas estudados para células hepáticas humanas Hepg2 (cultura, tripsinização e MTT-assay). Análise dos resultados obtidos.
- 5 – Elaboração do relatório final de projeto.

PT10

Desenvolvimento de revestimentos anti-incrustantes com nanopartículas derivadas de produtos naturais.

Este tema insere-se num projeto financiado em curso e resulta de uma parceria com a empresa Alga+ (<https://www.algaplus.pt/>) que visa a inovação na utilização de algas produzidas por esta empresa portuguesa. O objetivo principal deste projeto é o desenvolvimento de revestimentos nano-bioativos marinhos inovadores, ecológicos e sustentáveis para prevenir a bioincrustação.

A bioincrustação é a colonização de microrganismos em biofilmes, os quais podem provocar a biocorrosão prematura de estruturas, pondo em risco operações industriais, conduzindo a avarias e aumentando o consumo de energia. Em ambientes de cuidados de saúde, a formação de biofilmes facilita a transmissão de agentes patogénicos e eleva o risco de biocontaminação.

A abordagem neste trabalho será a utilização de uma alga cultivada pela empresa, rica em compostos bioativos, para desenvolver um revestimento anti-incrustante inovador, como alternativa às soluções atuais no mercado, que apresentam toxicidade humana e ambiental e necessitam de processos de limpeza dispendiosos.

O trabalho proposto envolve três etapas principais:

1) Síntese e Caracterização de Nanopartículas de Prata: nanopartículas de prata serão sintetizadas utilizando biomassa da alga por métodos de química verde e caracterizadas por espectroscopia de FTIR, microscopia de força atómica (AFM) e dynamic light scattering (DLS). A presença dos compostos bioativos nas nanopartículas será avaliada por cromatografia líquida de alta eficiência com deteção por rede de díodos (HPLC-DAD) e a toxicidade será avaliada em linhas celulares humanas.

2) Desenvolvimento e Caracterização do Revestimento Nano-Bioativo: o revestimento bioativo será formulado e otimizado com a incorporação das nanopartículas bioativas de prata que será avaliado quanto a propriedades físico-químicas/mecânicas por técnicas como FTIR-ATR, dureza shore, rugosidade, adesão pull off e/ou por corte, espessura dos revestimentos.

3) Avaliação da Atividade Antimicrobiana: o revestimento desenvolvido será avaliado relativamente às suas propriedades antimicrobianas contra microrganismos modelo (ex: *S. aureus*, *E. coli*)

Este projeto está alinhado com os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS) das Nações Unidas, particularmente o ODS 12 (Consumo e Produção Responsáveis), ao promover a valorização sustentável de recursos marinhos nacionais e à produção de soluções ecológicas.

O aluno beneficiará ao participar em atividades alinhadas com os níveis de Technology Readiness Level (TRL) 3 a 5, Prova de Conceito Experimental, Validação de Componentes em Ambiente Laboratorial e em Ambiente Relevante, dada a colaboração com a empresa. No final do projeto, espera-se que o aluno tenha desenvolvido capacidades na síntese de nanopartículas, formulação de revestimentos e ensaios antimicrobianos.

PT11

Revestimentos para Betão: 10 anos de luta contra reações químicas expansivas

Proposta de plano de trabalho:

1. Seleção de provetes de betão (com mais de 10 anos de exposição em ambientes natural, acelerado e de imersão) com revestimento aplicado e preparação de amostras para caracterização.
2. Realização de vários ensaios, entre os quais, análise por Espectroscopia de Infravermelho por Transformada de Fourier (FTIR), Microscopia Eletrónica de Varredura (MEV) e Espectroscopia de Energia Dispersiva (EDS) e outras técnicas relevantes para identificar mudanças estruturais e químicas nos revestimentos envelhecidos. Será também avaliada a integridade e o estado da camada de revestimento, com foco em sinais de descolamento e fissuração.
3. Comparação entre os resultados obtidos e o estudo inicial já existente.

NOTA: Este projeto será parcialmente realizado nas instalações do Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

PT12

Desenvolvimento de novos biocidas para o controlo sustentável do nemátode da madeira do pinheiro

O nemátode da madeira do pinheiro (NMP) é um animal microscópico, vermiforme, cujo nome científico é *Bursaphelenchus xylophilus*, e que causa a doença da marchidão 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, cujos usos têm nocivos impactes 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 (doi.org/10.3390/ecsoc-25-11641; doi.org/10.3390/ecsoc-26-13536). Os resultados positivos obtidos para compostos de cadeia alifática contendo grupos carbonilo e alcóois de óleos essenciais, usados em ensaios de contato direto com o *B. xylophilus*, direcionaram este estudo para a modificação química enantioselectiva.

Assim, neste projeto a estratégia envolve o estudo da redução seletiva de uma dialquil cetona assimétrica e deteção por Cromatografia de fase Gasosa (GC) com coluna quiral dos álcoois enantioméricos. A atividade dos enantiómeros será posteriormente avaliada através de ensaios de contato direto, possibilitando o desenvolvimento de bionematicidas de atividade melhorada.

Neste trabalho, recorrer-se-á a metodologias de:

- Síntese química, na obtenção de alcóois alifáticos modificados por síntese assimétrica e estudo da relação estrutura-atividade nematicida.
- Química analítica, especificamente a utilização de GC-MS (quiral) para seguimento das reações de síntese.

O objetivo final consiste na identificação das diretrizes químicas que regem a atividade nematicida destes compostos, na sua integração para o desenvolvimento de compostos com aumento da atividade *in vitro*. A atividade nematicida dos compostos será efetuada em colaboração com o Doutor Jorge Faria do Laboratório de Nematologia do Instituto Nacional de Investigação Agrária e Veterinária (INIAV), Oeiras.

PT13

Estudo de materiais porosos metal-orgânicos como potenciais veículos para o armazenamento e libertação de NO e de H₂S em concentrações terapêuticas

O óxido nítrico (NO) e o sulfeto de hidrogênio (H₂S) são importantes gasotransmissores com múltiplas funções fisiológicas. Sendo substâncias gasosas, a sua administração em terapias levanta dificuldades específicas. Nos anos recentes, várias famílias de materiais porosos têm vindo a ser estudadas com o objetivo de encontrar sistemas que sejam capazes de armazenar e posteriormente libertar NO e/ou H₂S em quantidades terapêuticas (nano-miliMolar), preferencialmente durante períodos longos (várias horas).

Aspetos importantes são estabilidade e a toxicidade dos materiais porosos a usar para este efeito. Neste trabalho pretende-se estudar estruturas metal-orgânicas (MOFs) cujos ligando orgânicos seja preferencialmente constituídos por moléculas orgânicas não tóxicas, como por exemplo vitaminas.

O trabalho não envolve a síntese de materiais, que será feita em colaboração com outros laboratórios mas sim, a avaliação da respetiva capacidade para armazenar e libertar NO e H₂S individualmente ou em combinação, bem como a avaliação da estabilidade das estruturas em diferentes meios biológicos.

Para alguns materiais poderá também ser realizada a caracterização da porosidade e da área superficial dos materiais.

PT14

Design de novas superfícies fotocatalíticas para a degradação de poluentes

A utilização de nanomateriais tem levantado preocupação crescente devido aos potenciais impactos na saúde humana, nomeadamente devido à sua pequena dimensão e potencial toxicidade [1]. Por outro lado, os nanomateriais agregam vantagens significativas quando comparados com materiais à escala macroscópica, por exemplo, relativamente às suas propriedades óticas, elétricas, magnéticas e razão área/volume [1]. A utilização de materiais catalíticos à escala nanométrica também acarreta problemas de recuperação para a sua reutilização e controlo da sua libertação no meio ambiente. Nesse sentido, a sua imobilização em substratos pode apresentar vantagens, tanto na sua recuperação como na oportunidade de conferir as propriedades desses nanomateriais a diversas superfícies, alargando assim a sua área de aplicabilidade [2-4].

Este trabalho tem como principais objetivos o estudo de metodologias de imobilização de fotocatalisadores em diferentes substratos de interesse industrial.

A imobilização, dos nanomateriais a serem usados será realizada recorrendo a metodologias selecionadas de acordo com as características do substrato, por exemplo imersão, drop-cast, incorporação em filmes poliméricos, etc, de modo a promover a estabilidade do compósito mantendo as propriedades do catalisador.

O seu desempenho fotocatalítico será avaliado para a remoção de poluentes modelo, recorrendo a estudos de adsorção e de fotodegradação. Está prevista a realização de ensaios recorrendo a exposição controlada a radiação visível (em laboratório) e a radiação solar (no exterior).

O processo de caracterização dos materiais será realizado recorrendo a técnicas analíticas adequadas.

1] M. Sajid, Curr. Opin. Env. Sci. Hl. 25 (2022) 100319.

[2] V.C. Ferreira, W.R. Wise, O.C. Monteiro, Ceram. Int. 46 (2020) 27508.

[3] V.C. Ferreira, A.J. Goddard, O.C. Monteiro, J. Photochem. Photobiol. A 357 (2018) 201.

[4] I.V.Ferreira, N.R.Neng, O.C.Monteiro, V.C.Ferreira, J. Photochem. Photobiol. A 453 (2024) 115653.

PT15

Avaliação da variação do teor de sulfureto de hidrogénio com a profundidade da água de barragens

A determinação do teor de sulfureto de hidrogénio em águas de barragens é de grande relevância para a gestão ambiental e proteção da barragem. O sulfureto de hidrogénio é um gás tóxico e corrosivo que se pode formar em ambientes aquáticos sob condições de baixa oxigenação, especialmente em camadas profundas das barragens, onde há menos circulação de água. Em altas concentrações, o H_2S pode prejudicar a vida aquática. Além disso, o sulfureto de hidrogénio corrói as estruturas metálicas e equipamentos das barragens. Desta forma, monitorar o teor de H_2S é fundamental para garantir a segurança ambiental, proteger a biodiversidade aquática e preservar a durabilidade das instalações hidráulicas.

O teor de sulfureto de hidrogénio (H_2S) geralmente aumenta com a profundidade em corpos de água estratificados, como barragens, devido à diminuição da concentração de oxigénio nas camadas mais profundas. Essa estratificação cria uma camada mais próxima da superfície, onde há maior oxigenação e atividade fotossintética, e uma camada mais profunda, onde o oxigénio é progressivamente reduzido pela decomposição de matéria orgânica. Quando o oxigénio é limitado, bactérias anaeróbias começam a decompor a matéria orgânica, produzindo H_2S como subproduto. Assim, nas camadas mais profundas, onde há baixa circulação de água e condições anóxicas, os níveis de H_2S tendem a ser mais altos. Este gás pode se acumular em concentrações consideráveis, especialmente em áreas com pouca renovação de água ou em épocas de calor, quando a estratificação térmica é mais acentuada.

Este projeto de licenciatura tem como objetivo desenvolver, validar e otimizar a incerteza da determinação volumétrica do teor de sulfureto de hidrogénio em águas doce com vista a detetar diferenças no valor deste parâmetro ao longo da profundidade de massas de água doce. A avaliação do impacto do título do titulante, toma de amostra e técnicas de determinação do ponto de equivalência na incerteza da determinação do teor de H_2S , permitirá definir uma estratégia de redução da incerteza da medição com vista a distinguir valores em diversas profundidades. Serão analisadas amostras de águas da barragem de Castelo de Bode à superfície, a 20 m e a 40 m de profundidade, recolhidas por mergulhadores técnicos, para comprovar a adequação das capacidades de medição desenvolvidas para distinguir valores em profundidade.

Este projeto permitirá ao aluno desenvolver e aplicar conhecimentos de química analítica a sistemas ambientais relevantes, e propor à comunidade científica formas de melhorar as capacidades de medição deste parâmetro com um menor dispêndio de recursos.

O projeto proposto adequa-se à carga horária definida para o mesmo e poderá ser publicado num jornal de química analítica de elevado fator de impacto.

PT16

Cristalização de compostos orgânicos com interesse em indústrias de química fina: os passos iniciais da sua formação a partir de solução

Este projeto tem por objetivo geral investigar os passos iniciais da cristalização de compostos orgânicos com interesse em indústrias de química fina, como a farmacêutica. Pretende-se, em particular, estudar o modo como variações sistemáticas da estrutura molecular e da natureza do solvente podem afetar o tipo de agregados formados em solução e a sua relação com as fases cristalinas originadas pelo processo de cristalização.

O trabalho será baseado na família de compostos do tipo 4'-HOC₆H₄COOR (R = H, alquilo) que é bastante versátil em termos de aplicações industriais. Por exemplo, a 4'-hidroxiacetofenona (R = CH₃) é usada como precursor de vários princípios ativos farmacêuticos, como a octopamina, a diclonina e o acetaminofeno e a 4'-hidroxiapropiofenona (R = C₂H₅) foi testada clinicamente no tratamento de doenças como o cancro da próstata.

O principal objetivo específico do projeto é analisar o efeito do comprimento da cadeia, do tipo de solvente e da concentração de soluto na agregação molecular em solução. Utiliza-se-ão solventes com capacidades de interação com o soluto diferentes: polares e próticos (e.g. H₂O e etanol), polares e apróticos (e.g. DMSO) e apolares e apróticos (e.g. acetato de etilo).

O estudo envolverá essencialmente medidas de densidade de soluções diluídas em função da concentração, a 298 K, recorrendo a um densímetro digital de tubo vibrante. Medidas rigorosas da densidade permitem determinar a variação com a composição dos volumes molares da solução bem como volumes molares aparentes e volumes de excesso do soluto. Através destas grandezas é possível inferir sobre a maior ou menor facilidade de formação de agregados em solução, precursores de processos de nucleação num dado solvente.

PT17

Montagem e teste de instrumento de Dispersão Dinâmica da Luz (DLS -Dynamic Light Scattering) para caracterização de sistemas heterogéneos de dispersões de nanopartículas em líquidos (nanofluidos).

Um nanofluido é uma dispersão diluída de nanopartículas (<100nm) num fluido de base e o seu estudo constitui recentemente um campo de grande interesse dado o enorme potencial de aplicação em diversas áreas, incluindo a indústria química, as aplicações biomédicas, o arrefecimento de componentes de electrónica, a lubrificação, e a engenharia energética e ambiental e a recuperação de calor.

Um dos principais desafios na obtenção e estudo dos nanofluidos é a sua estabilidade a longo prazo. Os problemas de aglomeração, sedimentação e erosão têm que ser examinados em detalhe tendo em vista as aplicações em particular. O melhoramento destas características obriga muitas vezes à introdução de dispersantes que tornam a mistura ainda mais complexa, com possíveis efeitos adversos nas propriedades. Logo é fundamental uma caracterização correcta destes sistemas, quer do tamanho das partículas e sua distribuição, da forma e aglomeração, bem como da dinâmica dessa aglomeração.

De entre as diversas técnicas de caracterização de nanofluidos e sua estabilidade está a Dispersão Dinâmica da Luz (DLS -Dynamic Light Scattering), que como o próprio nome indica, faz essa caracterização analisando as propriedades da luz dispersa pelas partículas que se movem em suspensão. No entanto, a aplicação desta técnica precisa de ter em conta as particularidades das amostras de nanofluidos que apresentam geralmente baixa transmitância e dispersam a luz com grande intensidade.

O objectivo deste projecto é o desenvolvimento de um instrumento baseado em DLS adequado para a caracterização de amostras de nanofluidos e sua estabilidade.

Proposta de plano de trabalho:

- 1- Estudo bibliográfico do estado da arte.
- 2- Condicionamento do novo laboratório e mesa ótica para remontagem do sistema de DLS.
- 3- Escolha dos sistemas de nanofluidos a estudar e planificação das experiências a realizar
- 4- Relatório intercalar sucinto.
- 5- Montagem e adaptação da instalação de DLS.
- 6- Medições experimentais para caracterização dos nanofluidos
- 7- Elaboração de relatório final.

PT18

Identificação de novas substâncias psicoativas

Os riscos associados ao consumo de drogas de abuso mudaram drasticamente com o aparecimento das novas substâncias psicoativas (NSP). As NSP, são novos estupefacientes ou novos psicotrópicos, puros ou numa preparação, que não fazem parte da lista de substâncias controladas pelos tratados das Nações Unidas sobre Drogas, nomeadamente a Convenção Única sobre Estupefacientes, de 1961 (emendada pelo protocolo de 1972) e a Convenção sobre as Substâncias Psicotrópicas, de 1971). O termo "novo" refere-se não só a substâncias recém-inventadas, mas também às substâncias já existentes quando utilizadas de forma imprópria. O termo NSP inclui substâncias sintéticas, produtos naturais ou misturas de ambos. As NSP pretendem mimetizar o efeito de uma droga ilegal, mas apresentam uma estrutura química diferente ou ligeiramente alterada de modo a poderem escapar às restrições legais daquelas substâncias.

Com objetivo final de contribuir para uma resposta proativa na resolução dos riscos associados ao consumo de NSP e no âmbito do protocolo entre a FCUL e a Associação Kosmicare, neste projeto pretende-se identificar as NSP presentes em produtos a serem potencialmente usados como drogas de abuso. A identificação envolverá a caracterização destas substâncias em produtos fornecidos pela Kosmicare 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). Se os produtos a analisar forem misturas complexas poderá ser necessário purificar as substâncias psicoativas por técnicas cromatográficas ou sintetizá-las para confirmar a sua estrutura molecular.

PT19

Dessulfurização oxidativa de moléculas modelo catalisada por nanocatalisadores de molibdénio

Nos últimos anos, a regulamentação ambiental sobre as emissões de enxofre e de seu conteúdo nos combustíveis fósseis tornou-se mais rigorosa. A Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (EPA) determinou que a partir de 2006 o índice de enxofre no diesel não devia exceder 15 ppm e na Europa, as regras foram implementadas em 2007 e o diesel deve conter menos de 10 ppm. As metas europeias estão cada vez mais restritivas e a evolução é de a quantidade de enxofre nos combustíveis continue a baixar de modo a atingir valores reduzidos e com um baixo impacto no meio ambiente. Assim é cada vez mais importante serem desenvolvidos métodos que usam catalisadores para diminuir a quantidade de enxofre a níveis cada vez mais baixos. A combustão de diesel, produz uma quantidade elevada de óxidos de enxofre (SO_x), que são responsáveis por diversos problemas entre os quais estão: a poluição do ar, a chuva ácida, corrosão de equipamentos, etc. Para atingir as metas impostas pela Comunidade Europeia em termos de emissões é necessário usar catalisadores mais seletivos e robustos para serem aplicados na dessulfurização oxidativa (ODS), de modo a atingir as metas

O principal objetivo deste trabalho é aplicar catalisadores baseados em nanopartículas magnéticas de ferro (Fe₃O₄) funcionalizadas com óxidos de molibdénio, Fe-MoO_x (x= 2 ou 3) para a remoção ou transformação de compostos de enxofre de moléculas modelo constituintes dos combustíveis e comparar os resultados com os obtidos com os catalisadores usados atualmente. As reações serão seguidas por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massa (GC-MS) para analisar e quantificar o(s) produto(s) final(ais).

Referências

1. M.N. Hossain, H.C. Park, H.S. Choi, A Comprehensive review on catalytic oxidative desulfurization of liquid fuel oil, *Catalysts*, 2019, 9, 229. <http://doi.org/10.3390/catal9030229>
2. A. Rajendran, T.-C. Cui, H.-X. Fan, Z.-F. Yang, J. Feng, W.-L. Li, A comprehensive review on oxidative desulfurization catalysts targeting clean energy and environment. *J. Mater. Chem. A*, 2020, 8, 2246–2285. <http://doi.org/10.1039/c9ta12555h>

PT20

Avaliação do impacto de alguns parâmetros experimentais nas propriedades de fotocatalisadores nanocristalinos

A definição das mais adequadas condições de síntese é muitas vezes apontada como de importância primordial para o sucesso do produto/material produzido. Na produção de nanomateriais, em que as propriedades são definidas pelas condições usadas na síntese, este parâmetro é ainda mais relevante.

Neste contexto pretende-se estudar a síntese, e caracterização, de materiais nanocristalinos de, por exemplo, TiO_2 e ZnO usando diferentes condições de temperatura, pressão e agitação.

Experimentalmente, o trabalho será iniciado pela calibração de um reator de síntese; posteriormente irão ser preparadas amostras em condições de síntese controladas. Será estudada a influência de parâmetros experimentais tais como temperatura, agitação e pressão.

O processo de caracterização dos materiais será realizado recorrendo a técnicas analíticas adequadas.

Do ponto de vista fotocatalítico, a caracterização destas amostras, será feita usando a degradação de um poluente modelo, quando submetido a radiação visível.

PT21

Desenvolvimento de materiais piezoelétricos com transição de spin para conversão de energia mecânica em elétrica

Introdução

A geração de energia a partir de fontes sustentáveis é uma necessidade crescente em resposta às mudanças climáticas e à necessidade de reduzir as emissões de carbono. Materiais piezoelétricos com transição de spin são promissores para essa finalidade, pois possuem a capacidade de converter energia mecânica em elétrica. Este projeto explora o potencial desses materiais, integrando propriedades piezoelétricas e transição de spin, que combinam as propriedades elétricas com propriedades magnéticas e energia mecânica.

Objetivos

- 1) Sintetizar e caracterizar materiais com capacidade de transição de spin, observando alterações nas suas propriedades mecânicas com diferentes estímulos, como temperatura e luz.
- 2) Caracterizar as propriedades piezoelétricas dos materiais através de microscopia de força atômica piezoelétrica (PFM).
- 3) Analisar o comportamento de transição de spin e a eficiência piezoelétrica dos materiais em condições controladas.
- 4) Estudar a estabilidade dos materiais sintetizados e sua viabilidade em aplicações de conversão de energia.

Testes de eficiência

Os materiais serão avaliados quanto à sua capacidade de gerar corrente elétrica sob compressão mecânica, utilizando PFM. A propriedade de transição de spin na eficiência do processo será também investigada. Serão realizados ensaios para determinar a durabilidade dos materiais em diferentes ciclos de carga e descarga.

Resultados esperados

Espera-se desenvolver um material piezoelétrico com transição de spin com eficiência na conversão de energia mecânica em elétrica, adequado para aplicações de baixo impacto ambiental e alta eficiência energética.

PT22

Regeneração térmica de carvões ativados granulares saturados com compostos farmacêuticos

O trabalho a realizar está integrado num estudo mais alargado que tem vindo a ser realizado no Laboratório de Adsorção e Materiais Adsorventes centrado no processo de regeneração de carvões ativados saturados com compostos farmacêuticos por adsorção a partir de soluções aquosas¹.

Assim, o trabalho que se propõe consistirá no estudo do processo de adsorção de um, eventualmente dois compostos farmacêuticos em solução aquosa num, ou eventualmente dois carvões granulares com dimensão de partícula bem definida. Tanto a(s) molécula(s) modelo como a dimensão de partícula serão definidos no início do projeto.

As amostras com diferentes graus de saturação serão sujeitas regeneração térmica sob fluxo de N₂ ou em atmosfera de vapor de água em condições a definir de acordo com os resultados das análises termogravimétricas.

Para avaliar a eficiência de regeneração, as amostras regeneradas serão testadas nas condições em que foram inicialmente saturadas e, caso os resultados sejam favoráveis (tanto no que diz respeito à eficiência de regeneração como à perda de massa durante o processo de regeneração), serão sujeitas a novo ciclo de regeneração-reutilização.

O processo de adsorção será seguido por UV-vis. As amostras de carvão fresco, saturado e regenerado serão caracterizados por diferentes técnicas, nomeadamente, adsorção de N₂ a -196 °C, determinação do pH no ponto de carga zero e termogravimetria.

De realçar que se numa parte inicial o trabalho esteja apenas centrado no processo de adsorção do composto farmacêutico no carvão ativado, quando se iniciarem os estudos de saturação/regeneração e a caracterização do material em estudo é feito em simultâneo

1. Tiago Ventura, Regeneração térmica de carvões ativados saturados com compostos farmacêuticos: sulfametoxazol versus paracetamol e cafeína, Projecto da Licenciatura em Química, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, 2022

PT23

Design de novos compostos de Cu para a terapia do cancro

O cancro é uma das principais causas de morte no mundo. A descoberta das propriedades antitumorais da cisplatina foi um dos marcos mais importantes para a terapia do cancro no século XX. Embora os fármacos de platina sejam um dos pilares no tratamento do cancro, os vários efeitos secundários causados por estes fármacos e resistência intrínseca ou adquirida limitam seriamente a sua utilização clínica. Estas limitações fizeram com que a investigação neste campo se estendesse a outros metais. Uma estratégia que tem sido utilizada baseia-se na utilização de metais endógenos, os quais poderão originar uma menor toxicidade sistémica e atingir mais facilmente alvos específicos. O cobre é um metal essencial que existe nos estados de oxidação +1 e +2 no corpo humano e desempenha um papel fundamental em vários processos biológicos que envolvem enzimas/proteínas, bem como no metabolismo energético e respiração celular. Nos últimos anos, os compostos de cobre têm emergido como uma classe promissora de potenciais agentes anticancerígenos, encontrando-se já alguns em estudos pré-clínicos avançados. Contudo, os complexos de Cu(I) são ainda muito pouco explorados. Durante os últimos anos, a supervisora deste trabalho tem vindo a desenvolver uma família de complexos de Cu(I) que se mostrou muito promissora contra vários cancros (mama, próstata, ovário etc.)[1,2], com valores de citotóxicidade na gama micromolar e índices de seletividade até 60 (células tumorais vs. normais)[1]. Este projecto visa a síntese e o estudo de novos complexos contendo Cu(I) com diferentes ligandos, com vista a potenciais aplicações no tratamento de vários tipos de cancros.

O trabalho compreende as seguintes vertentes:

- i) Síntese dos complexos de Cu(I);
- ii) Caracterização dos compostos pelas técnicas espectroscópicas usuais: FT-IR, UV-VIS e RMN multinuclear incluindo espectros bidimensionais. Serão realizadas análises elementares de %C, H%, N%, S%, etc. para obter uma garantia da pureza dos compostos. Determinação da estrutura cristalina por difracção de raios X quando adequado;
- iii) Serão realizados estudos complementares por voltametria cíclica para avaliar os possíveis estados de oxidação do Co, bem como a estabilidade e reatividade das várias espécies redox – se o tempo o permitir;
- iv) Serão realizados estudos de estabilidade em DMSO e meio fisiológico por UV-Vis. e RMN;
- v) Avaliação das potencialidades anti-tumorais dos novos compostos em várias linhas celulares cancerígenas humanas (estudos realizados em colaboração, não será efetuado pelo aluno).

[1] Machado, J. F.; Sequeira, D.; Marques, F.; Piedade, M. F. M.; Brito, M. J. V.; Garcia, M. H.; Fernandes, A. R.; Morais T. S. (2020) Dalton Trans., 49, 12273–12286.

[2] Machado, J. F.; Marques, F.; Pinheiro, T.; Brito, M. J. V.; Scalese, G.; Pérez-Díaz, L.; Otero, L.; António, J. P. M.; Gambino, D.; Morais, T. S. (2023) ChemMedChem, e202300074

PT24

Carvões ativados obtidos a partir de macroalgas para remoção de compostos farmacêuticos

A biomassa é geralmente considerada um recurso renovável que pode substituir parcialmente as fontes fósseis e permitir reduzir a emissão de CO₂ contribuindo para um desenvolvimento mais sustentável. A biomassa de origem marinha oferece várias vantagens face à terrestre, já que não implica a utilização de terras agrícolas, mas também apresenta desafios associados ao elevado teor em água e sais. A costa portuguesa apresenta uma grande diversidade de macroalgas verdes, vermelhas e castanhas das quais se podem extrair diferentes compostos tais como polissacarídeos, ácidos gordos e diversos metabolitos secundários com potencial aplicação biotecnológica em diferentes áreas. Contudo, a biomassa remanescente da macroalga após o processo de extração corresponde a mais de 80 % da sua massa original e mantém a sua estrutura hemicelulósica, continuando a ser um resíduo sólido valioso.

Neste projeto, o estudante irá explorar a carbonização hidrotérmica do *Gelidium corneum*, uma macroalga vermelha, intacta e também do resíduo sólido após processos de extração de compostos bioativos para aplicações biotecnológicas. Os biocarbonizados obtidos serão ativados com vapor de água para dar origem a carvões ativados, materiais adsorventes com numerosas aplicações tecnológicas. Os materiais serão caracterizados por adsorção de N₂ a -196 °C, DRX, FTIR, pH no ponto de carga zero, teor em cinzas e em humidade, assim como densidade aparente. Como prova de conceito os carvões ativados serão ensaiados para a remoção de diclofenac (composto farmacêutico) de soluções aquosas realizando ensaios cinéticos e isotérmicas de adsorção de equilíbrio. A quantificação do composto farmacêutico será realizada por espectrofotometria UV-vis.

O presente projeto permitirá ao aluno o contato com diversas técnicas para a síntese e caracterização de materiais que permitirão reunir dados para a comparação dos materiais obtidos, assim como a análise dos resultados obtidos nos ensaios de adsorção em fase líquida. Este trabalho contará com a colaboração do Centro de Ciências do Mar e do Ambiente (MARE) - Pólo do Politécnico de Leiria – que disponibilizará a macroalga intacta e extraída.

Martins, A., Silva, J., Alves, C., Pinteus, S., Félix, C., Augusto, A., Pedrosa, R., Mestre, A. S., Santos, R. M. M., Carvalho, A. P., Goettert, M., Laufer, S., & Lemos, M. F. L. Towards a zero-waste sustainable biorefinery of *Codium* sp. seaweed: From bioactives application to soil enhancement materials. *Journal of Cleaner Production*, 453 (2024) 142191. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2024.142191>

Mestre, A. S., Pires, R. A., Aroso, I., Fernandes, E. M., Pinto, M. L., Reis, R. L., Andrade, M. A., Pires, J., Silva, S. P., & Carvalho, A. P. Activated carbons prepared from industrial pre-treated cork: Sustainable adsorbents for pharmaceutical compounds removal. *Chemical Engineering Journal*, 253 (2014) 408-417. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2014.05.051>

PT25

Caracterização solvatocrómica e modelação da mistura ternária água-etanol-N-formilmorfolina

Apesar dos avanços tecnológicos com vista à redução do uso de solventes, a utilização de um solvente adequado continua a ser um fator determinante no desenvolvimento, por exemplo, de APIs (Active Pharmaceutical Ingredients). Neste sentido, a utilização da N-formilmorfolina (NFM) em misturas aquosas, mostrou-se uma solução “mais verde”, quando comparada com a utilização de solventes como o DMSO ou a DMF, para solubilizar compostos com importância farmacológica[1].

A polaridade do solvente é, também, um aspeto fundamental a ter em conta no desenho racional (solvent engineering) de meios apropriados para uma determinada aplicação. Neste contexto, foi recentemente publicada a caracterização de misturas binárias de NFM com água, álcoois e acetato de etilo utilizando diversas sondas solvatocrómicas[2]. É, no entanto, amplamente reconhecido que, a utilização de misturas ternárias aumenta significativamente o âmbito destes estudos trazendo muitas vezes novos insights relativamente ao conhecimento das interações soluto-solvente-solvente subjacentes a estes processos[3].

Neste trabalho propomos uma caracterização solvatocrómica em todo o espaço composicional da referida mistura ternária. O plano de trabalhos inclui: i) a determinação do máximo de absorção por espectroscopia de UV-Vis de diversas sondas solvatocrómicas sensíveis a diferentes tipos de interação soluto-solvente, em várias frações das misturas binárias e ternária; ii) o cálculo dos parâmetros solvatocrómicos de polaridade do solvente; e iii) a aplicação de modelos matemáticos para estudar fenómenos de solvatação preferencial na mistura ternária investigada.

Referências bibliográficas:

[1] Przybyłek, M.; Miernicka, A.; Nowak, M.; Cysewski, P. *Molecules* 2022 27, 3323.

[2] Pasham, F.; Jabbari, M.; Farajtabar, A J. *Chem. & Eng. Data* 2020 65 (11), 5458.

[3] Nunes, N., Elvas-Leitão, R., Martins, F. *Spectrochim. Acta Part A: Mol. & Biomol. Spect.* 2014 124, 470-479.

PT26

Síntese e incorporação de nanopartículas metálicas em filmes poliméricos para o desenvolvimento de biossensores eletroquímicos e óticos

A polidopamina (PDA) é um polímero insolúvel de elevado interesse tecnológico, inspirado nas propriedades adesivas dos mexilhões marinhos que se fixam a superfícies húmidas. Em meio alcalino e na presença de um oxidante como o oxigénio molecular, a dopamina, que contém grupos amina e catecol, mimetizando os aminoácidos presentes na cola do mexilhão, sofre uma polimerização oxidativa espontânea, revestindo praticamente qualquer tipo de superfície desde metais, óxidos e semicondutores, até polímeros plásticos, com um filme fino e uniforme [1]. Possui assim propriedades adesivas importantes, devido fundamentalmente ao seu grupo catecol, podendo imobilizar de modo muito eficaz biomoléculas e metais, incluindo nanopartículas. Deste modo, a PDA tem sido explorada recentemente para o desenvolvimento de interfaces biossensoras, tanto para a área ambiental como para a saúde.

Este projeto tem como objetivo explorar metodologias simples para a imobilização de nanopartículas metálicas com reconhecidas propriedades óticas e eletricamente condutoras em filmes de policatecolaminas (dopamina e seus derivados, tal como a norepinefrina), por forma a aumentar o desempenho destas matrizes poliméricas em biossensores enzimáticos [2] e imunossensores [3] para a deteção de compostos fenólicos ou toxinas, respetivamente. Em concreto, o projeto tecnológico, envolverá as seguintes etapas:

- i) síntese e caracterização de nanopartículas de ouro esféricas e em forma de bastonete;
- ii) síntese de filmes de policatecolaminas em materiais plásticos não condutores (ex. acrílico), por métodos químicos, e em elétrodos de carbono, por eletropolimerização.
- iii) adsorção das nanopartículas sintetizadas nos filmes de PDA e caracterização das suas propriedades óticas e eletroquímicas;
- iv) imobilização das biomoléculas (enzimas e/ou anticorpos) e avaliação do desempenho das superfícies modificadas na quantificação de analitos alvo, tais como compostos fenólicos ou toxinas em resíduos agroindustriais, por espectroscopia de UV-Vis e métodos eletroquímicos (ex. cronoamperometria), respetivamente.

[1] J.H. Ryu, P.B. Messersmith, H. Lee, Polydopamine Surface Chemistry: A Decade of Discovery, ACS Applied Materials & Interfaces, 2018, 10, 7523.

[2] L.C. Almeida, R.D. Correia, G. Squillaci, A. Morana, F. La Cara, J.P. Correia, A.S. Viana, Electrochim. Acta, 2019, 319, 462.

[3] L.C. Almeida, T. Frade, R.D. Correia, Y. Niu, G. Jin, J.P. Correia, A.S. Viana, Scientific Reports, 2021, 11, 1.