

INDICADORES DE DESEMPENHO CIENTÍFICO CQC – 2020

LIVROS E CAPÍTULOS DE LIVROS

1. Nunes, C. M., Reva, I, Fausto, R., *Direct Observation of Tunneling Reactions by Matrix Isolation Spectroscopy*, in *Tunnelling in Molecules: Nuclear Quantum Effects from Bio to Physical Chemistry*, Kästner, J., Kozuch, S., Eds., The Royal Society of Chemistry, London (UK). Theoretical and Computational Chemistry Series, 18, Chapter 1, pp. 1-60, 2020.
DOI: 10.1039/9781839160370-00001
eISBN: 978-1-83916-037-0
2. Costa, E., Sousa, A., Cabrita, A. S., Reis, C. P., Figueiredo, I. V., *A new approach for cancer treatment: from specific induction of breast cancer to innovative gold-nanoparticle mediated thermal therapies*. In *Nanomedicines for Breast Cancer Theranostics*, pp. 269-298. Elsevier, 2020.
DOI: 10.1016/B978-0-12-820016-2.00012-4
ISBN: 9780128200162
3. Pereira, M. M., Carrilho, R. M. B., Pinto, S. M. P., Calvete, M. J. F., *Tervalent Phosphorus Acid Derivatives*, in *Organophosphorus Chemistry Volume 49*, (Eds. Allen, D. W., Loakes, D., Tebby, J. C.), Specialist Periodical Reports Series, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, Vol. 49, pp 110-147, 2020.
DOI: 10.1039/9781788019491-00110
ISBN: 978-1-78801-864-7
4. Rodrigo, M. M., Ribeiro, A. C. F., Verissimo, L. M. P., Cabral, A. M. T. D. P. V., Valente, A. J. M., Estes, M. A., *Characterization of Some Carbohydrates in Aqueous Solutions as Seen by Mutual Diffusion* in *Chemistry and Chemical Engineering for Sustainable Development. Best Practices and Research Directions, Chemical Engineering Innovations in Physical Chemistry: Monograph Series* (Eds. Estes, M. A., Ribeiro, A. C. F., Haghi, A. K.), Apple Academic Press. Toronto, New Jersey, Chap.7, pp. 167-178, 2020.
ISBN: 9781771888707.
5. Galindres, D. M. G., Ribeiro, A. C. F., Vargas, E. F., Veríssimo, L. M. P., Valente, A. J. M., Estes, M. A., *Limiting Diffusion Coefficients of Bovine Serum Albumin in Aqueous Solutions of Sulfonated Resorcinarenes*) in *Chemistry and Chemical Engineering for Sustainable Development. Best Practices and Research Directions, Chemical Engineering Innovations in Physical Chemistry: Monograph Series* (Eds. Estes, M. A., Ribeiro, A. C. F., Haghi, A. K.), Apple Academic Press. Toronto, New Jersey, Chap.1, pp. 1-13, 2020.
ISBN: 9781771888707.
6. Santos C. I. A. V., Ribeiro A. C. F., Estes M. A., *Drug Delivery Systems: Study of Quaternary Systems Methylxanthine + Cyclodextrin + KCl + Water at (298.15 And 310.15) K*, em *Chemistry and Chemical Engineering for Sustainable Development. Best Practices and Research Directions*, (Eds. Estes, M. A., Ribeiro, A. C. F., Haghi, A. K.), Chemical Engineering Innovations in Physical Chemistry: Monograph Series, Apple Academic Press (USA), Chap 15, pp. 293-329, 2020.
ISBN:9781771888707

7. Ribeiro, A. C. F., Azevedo, E. F. G., Figueira, A. P. C. F., Lobo, V. M. M., *Transport Phenomena of Electrolytes in Aqueous Solutions: Concepts, Approaches, and Techniques*) in "Green Chemistry and Green Engineering Processing, Technologies, Properties, and Applications (Eds. Kulkarni, S., Rawat, K., Hagui, A. K.), Apple Academic Press. Toronto, New Jersey., Chap. 14, 2020.

ISBN: 9781771889001

8. Faro, M. P. R. T., Ribeiro, A. C. F., Santos, C. I. A. V., *Geological carbon capture-a literature review on diffusion coefficients for hydrocarbons in supercritical CO₂*, em *Research Methodologies in Applied Chemistry with Multidisciplinary Perspectives: Innovations and Visions for the Future*, (Ed. Haghi A. K.), Nova Science Publishers (USA), Chemistry Research and Applications Series, Chap. 6, pp. 83-114, 2020.

ISBN:978-1-53617-763-3.

9. Romero, C. M., Estes, M. A., *Thermodynamic and Transport Properties of Amino Acids in aqueous solutions*, Series: Innovations in Physical Chemistry. Chemistry and Chemical Engineering for Sustainable Development: Best Practices and Research Directions (Eds. Estes, M. A., Ribeiro, A. C. F., Haghi, A. K.), Apple Academic Press Inc., Burlington, Canada, Chap. 4, pp. 83-106, 2020.

ISBN: 978-1-77188-870-7.

10. Campos, M. G., *Soy isoflavones*, In *Handbook of Dietary Phytochemicals*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg (Eds. Xiao, J., Sarker, S. D., Asakawa, Y.) Chap.8 pp 1-38, 2020.

DOI: 10.1007/978-981-13-1745-3_8-1

ISBN: 978-981-15-4147-6 Online ISBN: 978-981-13-1745-3

11. Consul, R., Lucas, F., Campos, M. G., *Ayahuasca: Inherent Dangers in Its Consumption*. In *Wild Plants: The Treasure of Natural Healers* (Eds: Rai M., Bhattarai, S.), CRC press USA Chap. 16, pp 402-425, 2020.

DOI: 10.1201/9781003020134

12. Catherine, D., Burrows H. D., Campos, M. G., Delattre, C., Encarnação, T., Marilyne Fauchon, M., Gagnard, C., Hellio, C., Ito, J., Laroche, C., Legrand, J., Michaud, P., Pais, A. C. C., Guillaume, Serive, B., Watanabe, M. M., *VI-Secondary metabolites analysis*), *Microalgal biomass of industrial interest: methods of characterization*. In *Handbook on characterization of biomass, biowaste and related byproducts* (Eds. LEGRAND J., Nzihou, A.), Springer Nature Handbook, Chapter 4. pp 537-639, 2020.

DOI: 10.1007/978-3-030-35020-8_4 | ISBN: 978-3-030-35020-8

13. Dupré, C., Burrows, H. D., Campos, M. G., Delattre, C., Encarnação, T., Fauchon, M., Gagnard, C., *Microalgal Biomass of Industrial Interest: Methods of Characterization*, in *Handbook on Characterization of Biomass, Biowaste and Related By-products*, 537-639. Springer International Publishing, 2020.

DOI: 10.1007/978-3-030-35020-8_4

14. Silva, J., Basso, J., Mendes, M., Sousa, J., Pais, A., Vitorino, C., *Tailoring drug and gene codelivery nanosystems for glioblastoma treatment*, in *Advances and Avenues in the Development of Novel Carriers for Bioactives and Biological Agents*, 141-182. Elsevier, 2020.

DOI: 10.1016/B978-0-12-819666-3.00005-5

15. Basso, J., Mendes, M., Fortuna, A., Vitorino, R., Sousa, J., Pais, A., Vitorino, C., *Nanotechnological approaches in cancer*, in *Drug Repurposing in Cancer Therapy*, 353-393. Elsevier, 2020.

DOI: 10.1016/B978-0-12-819668-7.00014-2

16. Mendes, M., Silva, J., Torres, J., Vitorino, C., *Polymer–lipid hybrid nanoparticles as an anticancer drug delivery platform*, in *Functional lipid nanosystems in cancer*. Singapura: Pan Stanford Publishing and CRC Press (Taylor & Francis), 2020.

ISBN: 9789814877268

17. Basso, J., Silva, J., Mendes, M., Sousa, J., Pais, A., Vitorino, C., *Cell Membrane-Mimetic Nanoparticles for Cancer Treatment: What Has Been Done So Far?*, in *Nanoparticle Drug Delivery Systems for Cancer Treatment*, editado por Hala Gali-Muhtasib, and Racha Chouaib, 75-103. Singapura: Jenny Stanford Publishing, 2020.

ISBN 978-981-4800-54- 9 (Hardcover), 978-0-429-34125-0 (eBook)

18. Miranda, M., Cardoso, C., Vitorino, C., *A regulatory framework for the development of topical nanomedicines*, in *Theory and Applications of Non-parenteral Nanomedicines*, editado por Sebastien Taurin, Prashant Kesharwani, Khaled Greish. Países Baixos: Elsevier Science and Technology, 2020.

DOI: 10.1016/B978-0-12-820466-5.00003-X

19. Basso, J., Sereno, J., Fortuna, A., Castelo-Branco, M., Vitorino, C., *Establishing xenograft glioblastoma models for use in preclinical development*, in *Nanotherapy for Brain Tumor Drug Delivery, Neuromethods Book Series*. Springer Nature, 2020.

DOI: 10.1007/978-1-0716-1052-7_12

20. Vitorino, C., Chapter 15: *Nanotechnological approaches in cancer: the role of Celecoxib and Disulfiram* in *Drug Repurposing in Cancer Therapy: Approaches and Applications*. Humana Press, 2020.

DOI: 10.1016/B978-0-12-819668-7.00014-2

21. Vitorino, C., Chapter I. *Recent trends in nanotechnology* in *Nanoparticles for Brain Drug Delivery*. 2020.

DOI: 10.1201/9781003119326

22. Vitorino, C., *Recent in vitro models for the blood-brain-barrier*, in *Nanoparticles for Brain Drug Delivery*. Elsevier, 2020.

DOI: 10.1201/9781003119326

23. Cova, T. F. G. G., Nunes, S. C. C., *Modelling and Simulation of Nanosystems for Delivering Drugs to the Brain*, in *Nanoparticles for Brain Drug Delivery*, 427-451. New York, Estados Unidos: Jenny Stanford Publishing, 2020.

DOI: 10.1201/9781003119326

24. Almeida, Z. L., Brito, R. M. M., *Structure and Aggregation Mechanisms in Amyloids*. Prime Archives in Molecular Sciences. Sławomir Lach, Ed., Vide Leaf, Hyderabad, India, 2020.

ISBN: 978-93-90014-20-0. DOI: 10.37247/PAMOLSCS.1.2020.9

25. Alves, N. G., Mata, A. I., Luís, J. P., Brito, R. M. M., Simões, C. J. V., (2020) *An Innovative Sequence-to-Structure-Based Approach to Drug Resistance Interpretation and Prediction: The Use of Molecular Interaction Fields to Detect HIV-1 Protease Binding-Site Dissimilarities*. In *Silico Methods for Drug Design and Discovery*. Simone Brogi, Teodorico Castro Ramalho, Kamil Kuca, José L. Medina-Franco and Marian Valko, Eds., Frontiers Media SA, Lausanne, Switzerland, 2020. ISBN: 9782889660575. DOI: 10.3389/fchem.2020.00612

26. Silva, F., Paulo, A., Pallier, A., Mème, S., Tóth, E., Gano, L., Marques, Geraldés, F., C. F. G. C., Castro, M. M. C. A., Cardoso, A. M., Jurado, A. S., López-Larrubia, P., Lacerda, S., Cabral Campello, M. P. *Dual Imaging Gold Nanoplatfoms for Targeted Radiotheranostics*, em *Prime Archives in Material Science*, 2nd Edition, Bogas, J. A., Ed., Vide Leaf, Hyderabad, India, 2020. ISBN: 978-93-90014-26-2.

27. Rodrigues, S. P. J., *Apontamentos historiográficos e prosapográficos sobre a personagem do "cientista louco"* In *História Interdisciplinar da Loucura, Psiquiatria e Saúde Mental X*, Sociedade de História Interdisciplinar da Saúde / Centro de Estudos Interdisciplinares do Século XX da Universidade de Coimbra - CEIS20 (Grupo de História e Sociologia da Ciência e da Tecnologia) (Coors. Ana Leonor Pereira e João Rui Pita), pp. 91-96, 2020.

ISBN: 978-989-54537-1-9

28. Rodrigues, S. P. J., *Cientistas, activistas e comunicação: oportunidades, armadilhas e perigos*, In *Atas de Congresso Internacional Educação, Ambiente e Desenvolvimento* (Oliveira, M., Carvalho, N., Santos, O., Eds.) OIKOS. pp. 336-347, 2020.

ISBN: 978-989-99054-9-8

EDIÇÃO DE LIVROS CIENTÍFICOS

1. Ribeiro, A. C. F., Estesó, M. A., *Theoretical and Empirical Analysis in Physical Chemistry: A Framework for Research*, Apple Academic Press Inc., Oakville, Canada, July 2020.

ISBN: 978-1-77188-856-1

2. Ribeiro, A. C. F., Estesó, M. A., Hagui, K. A., *Chemistry and Chemical Engineering for Sustainable Development: Best Practices and Research Directions*, Apple Academic Press Inc., Burlington, Canada. September 2020.

ISBN: 978-1-77188-870-7

3. Vitorino, C., *Nanoparticles for Brain Drug Delivery*. Pan Stanford Publishing and CRC Press (Taylor & Francis). 2020.

DOI: 10.1201/9781003119326

EDIÇÃO DE NÚMEROS ESPECIAIS DE REVISTAS CIENTIFICAS

1. Ekicibil, A., Çağlar, Y., Gupta, R. K., Fausto, R., Eds., *J. Mol. Struct.* (Special Issue on *Materials Science and Nanotechnology*), Elsevier Science, Amsterdam (Holland), 2020. (Cover authored by Fausto, R.).

DOI: 10.1016/j.molstruc.2020.128208

2. Ali Köse, D., Sağlam, E. G., Fausto, R., Eds., *J. Mol. Struct.* (Special Issue on *Molecular Structure, Spectroscopy and Reactivity: A Collection of Selected Communications Presented at the VIIth Inorganic Chemistry Congress – Çorum - Turkey*), Elsevier Science, Amsterdam (Holland), 2020. (Cover authored by Fausto, R.).

DOI: 10.1016/j.molstruc.2020.128121

3. Drozd, M., Fausto, R., Eds., *J. Mol. Struct.* (Special Issue *From Molecules to Molecular Materials, Biological Molecular Systems and Nanostructures: A Collection of Contributions Presented at the XVth International Conference on Molecular Spectroscopy*), Elsevier Science, Amsterdam (Holland), 2020. (Cover authored by Fausto, R.).

DOI: 10.1016/j.molstruc.2020.128974

4. Fausto, R., Ildiz, G. O., Eds., *Molecules* (Special Issue on *Biomedical Applications of Infrared and Raman Spectroscopy*), MDPI, Basel (Switzerland), 2020.

HTTP: https://www.mdpi.com/journal/molecules/special_issues/Infrared_Raman

5. Fausto, R., Turrell, S., Ildiz, G. O., Eds., *Molecules* (Special Issue on *Molecular Spectroscopy and Molecular Structure: Commemorative Issue in Honor of Professor Austin J. Barnes on Occasion of his 75th Birthday*), MDPI, Basel (Switzerland), 2020.

HTTP: https://www.mdpi.com/journal/molecules/special_issues/moleclar_struc

6. Wu, Y., Fausto, R., Eds., *J. Mol. Struct.* (Special Issue on *Trends in Two Dimensional Correlation Spectroscopy*), Elsevier Science, Amsterdam (Holland), 2020. (Cover authored by Fausto, R.).

DOI: 10.1016/j.molstruc.2020.129280

7. Fausto, R., Haupa, K. A., Biczysko, M., Tarczay, G., Eds., *J. Mol. Struct.* (Special Issue *Professor Zofia Mielke – A Real Women of Science*), Elsevier Science, Amsterdam (Holland), 2020.

DOI: 10.1016/j.molstruc.2020.129481

8. Vitorino, C. Cova, T., Nunes, S.C.C., *Development and Characterization of Nanocarriers for Drugs, Processes* (2020).

ISSN 2227-9717

9. Vitorino, C., *Pharmaceutical development and regulatory aspects of drug products for skin delivery: what is new?* (2020).

ISSN 1999-4923

**ARTIGOS PUBLICADOS EM REVISTAS CIENTÍFICAS INTERNACIONAIS
COM REVISÃO POR PARES**

1. Lopes Jesus, A. J., Reva, I., Nunes, C. M., Roque, J. P. L., Pinto, S. M. V., Fausto, R., *Kinetically Unstable 2 Isocyanophenol Isolated in Cryogenic Matrices: Vibrational Excitation, Conformational Changes and Spontaneous Tunneling*, *Chem. Phys. Lett.*, 747, Art. 137069, 2020.

DOI: 10.1016/j.cplett.2019.137069

2. Golbedaghi, R., Tabanez, A. M., Fausto, R., Esmaeili, S., *Biological Applications of Macrocyclic Schiff Base Ligands and Their Metal Complexes: A Survey of the Literature (2005-2019)*, *Appl. Organomet. Chem.*, 3, Art. e5844, 2020.

DOI: 10.1002/aoc.5884

3. Simões, M. F., Nogueira, B. A., Tabanez, A. M., Fausto, R., Pinto, R. M. A., Simões, S., *Enhanced Solid-State Stability of Amorphous Ibrutinib Formulations Prepared by Hot-Melt Extrusion*, *Intl. J. Pharmaceut.*, 579, Art. 119156, 2020.

DOI: 10.1016/j.ijpharm.2020.119156

4. Brás, E. M., Cabral, L. I. L., Amado, P. S. M., Abe, M., Fausto, R., Cristiano, M. L. S., *Photoinduced Reactivity in a Dispiro-1,2,4-trioxolane: Adamantane Ring Expansion and First Direct Observation of the Long-Lived Triplet Diradical Intermediates*, *J. Phys. Chem. A*, 124, pp. 4202-4210, 2020.

DOI: 10.1021/acs.jpca.0c01974

5. Nogueira, B. A., Castiglioni, C., Fausto, R., *Color Polymorphism in Organic Crystals*, *Comm. Chem. - Nature*, 3, Art. 34, 2020.

DOI: 10.1038/s42004-020-0279-0

6. Lopes, S., Nikitin, T., Fausto, R., *Matrix Isolation Study of Methyl Propiolate in Argon and Nitrogen Matrices*, *Chem. Phys. Lett.*, 749, Art. 137427, 2020.

DOI: 10.1016/j.cplett.2020.137427

7. Ildiz, G. O., Bayari, S., Aksoy, U. M., Yorgunere, N., Bulut, H., Yilmaz, S. S., Halimoğlu, G., Nur Kabuk, H., Yavuza, G., Fausto, R., *Auxiliary Differential Diagnosis of Schizophrenia and Phases of Bipolar Disorder Based on the Blood Serum Raman Spectra*, *J. Raman Spectrosc.*, 51, pp. 2233-2244, 2020.

DOI: 10.1002/jrs.5976

8. Ildiz, G. O., Bayari, S., Karadag, A., Kaygisize, E., Fausto, R., *Fourier Transform Infrared Spectroscopy Based Complementary Diagnosis Tool for Autism Spectrum Disorder in Children and Adolescents*, *Molecules*, 25, Art. 2079, 2020.

DOI: 10.3390/molecules25092079

9. de Lima, F. B., Rodrigues, G. P., Lucena, J. R., Jr., Ventura, E., Fausto, R., Reva, I., do Monte, S. A., *A Comparative Multi-Reference Configuration Interaction Study of the Low-lying States of Two Thione Isomers of Thiophenol*, *Intl. J. Quant. Chem.*, 120, Art. e26263, 2020.

DOI: 10.1002/qua.26263

10. Tabanez, A. M., Nogueira, B. A., Eusébio, M. E. S., Paixão, J. A., Nur Kabuk, H., Jajuga, M., Ildiz, G. O., Fausto, R., *Thiabendazole and Thiobendazole-Formic Acid Solvate: A Computational, Crystallographic, Spectroscopic and Thermal Study*, *Molecules*, 25, Art. 3083, 2020.
DOI: 10.3390/molecules25133083
11. Góbi, S., Reva, I., Tarczay, G., Fausto, R., *Amorphous and Crystalline Thioacetamide: Temperature Dependent Structure and Infrared Spectra*, *J. Mol. Struct.*, 1220, Art. 128719, 2020.
DOI: 10.1016/j.molstruc.2020.128719
12. Nogueira, B. A., Ildiz, G. O., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., Henriques, M. S. C., Paixão, J. A., Fausto, R., *Conformational Landscape and Polymorphism in 5-Acetic Acid Hydantoin*, *J. Phys. Chem. A*, 124, pp. 6303-6318, 2020.
DOI: 10.1021/acs.jpca.0c03789
13. Lopes, S., Nikitin, T., Fausto, R., *Structural, Spectroscopic and Photochemical Study of Ethyl Propiolate Isolated in Cryogenic Argon and Nitrogen Matrices*, *Chem. Phys. Lett.*, 241, Art. 118670, 2020.
DOI: 10.1016/j.saa.2020.118670
14. Maksimova, A. A., Petrova, E. V., Chukin, A. V., Karabanalov, M., Nogueira, B. A., Fausto, R., Yesiltas, M., Felner, I., Oshtrakh, M. I., *Characterization of Kemer L4 Meteorite Using Raman Spectroscopy, X-Ray Diffraction, Magnetization Measurements and Mössbauer Spectroscopy*, *Spectrochim. Acta A*, 242, Art. 118723, 2020.
DOI: 10.1016/j.saa.2020.118723
15. Nogueira, B. A., Milani, A., Ildiz, G. O., Paixão, J. A., Castiglioni, C., Fausto, R., *Polymorphism of 1-Methylhydantoin Investigation by Periodic DFT calculations and Characterization of the Third Polymorph*, *CrystEngCom.*, 22, pp. 6347-6359, 2020.
DOI: 10.1039/D0CE01016B
16. Nunes, C. M., Viegas, L. P., Wood, S. A., Roque, J. P. L., McMahon, R. J., Fausto, R., *Heavy-Atom Tunneling Through Crossing Potential Energy Surfaces: Cyclization of a Triplet 2-Formylarylnitrene to a Singlet 2,1-Benzisoxazole*, *Angewante Chemie Intl. Ed.*, 59, pp. 17622-17627, 2020 – “VIP paper – Top 5%”.
DOI: 10.1002/anie.202006640
17. Nogueira, B. A., Ildiz, G. O., Tabanez, A. M., Henriques, M. S. C., Paixão, J. A., Fausto, R., *The Crystal Structure and Raman Spectrum of the Sodium Salt of 5-Acetic Acid Hydantoin*, *J. Mol. Struct.*, 1222, Art. 128897, 2020.
DOI: 10.1016/j.molstruc.2020.128897
18. Nunes, C. M., Pereira, N. A. M., Reva, I., Amado, P. S. M., Cristiano, M. L. S., Fausto, R., *Bond-Breaking/Bond-Forming Reactions by Vibrational Excitation: Infrared-Induced Bidirectional Tautomerization of Matrix-Isolated Thiotropolone*, *J. Phys. Chem. Lett.*, 11, pp. 8034-8039, 2020.
DOI: 10.1021/acs.jpcllett.0c02272

19. Ildiz, G. O., Fausto, R., *Conformational Analysis, Spectroscopy and Photochemistry of Matrix-Isolated 1H- and 2H- Tautomeric Forms of Ethyl Tetrazole-5-Carboxylate*, *J. Photochem. Photobiol. A: Chemistry*, 404, Art. 112899, 2020.
DOI: 10.1016/j.jphotochem.2020.112899
20. Lopes Jesus, A. J., Rosado, M. T. S., Fausto, R., Reva, I., *UV-Induced Radical Formation and Isomerization in 4-Methoxyindole and 5-methoxyindole*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 22, pp. 22943-22955, 2020.
DOI: 10.1039/D0CP04354K
21. Ildiz, G. O., Fausto, R., *Structural Aspects of the ortho Chloro- and Fluoro- Substituted Benzoic Acids: Implications on Chemical Properties*, *Molecules*, 25, Art. 4908, 2020.
DOI: 10.3390/molecules25214908
22. Roque, J. P. L., Sharma, A., Rosado, M. T. S., Fausto, R., Reva, I., *Vibrationally Induced Conformational Isomerization and Tunneling in Pyrrole-2-Carboxylic Acid*, *J. Phys. Chem. A*, 124, pp. 10277-10287, 2020.
DOI: 10.1021/acs.jpca.0c09141
23. Oliveira, A. C., Costa T., Justino, L. L. G., Fausto, R., Morfin, J.-F., Tóth, E., Geraldés, C. F. G. C., Burrows, H. D., *Photophysical studies on lanthanide(III) chelates conjugated to Pittsburgh compound B as luminescent probes targeted to A β amyloid aggregates*, *Photochem. Photobiol. Sci.*, 19, pp. 1522-1537, 2020.
DOI: 10.1039/d0pp00214c
24. Baptista, J. A., Eusébio, M. E. S., Pereira, M. M., *New renewable raw materials for thermal energy storage*, *J. Therm. Anal. Calorim.*, 2020.
DOI: 10.1007/s10973-020-09685-w
25. Dryzek, E., Juszynska-Galazka, E., Zaleski, R., Jasinska, B., Eusébio, M. E. S., *Free volume in the smectic-E phase of 4-hexyl-4' isothiocyanatobiphenyl studied by positron annihilation spectroscopy*, *Physical Review E*, 101, 022705, 2020.
DOI: 10.1103/PhysRevE.101.022705
26. Schaberle, F. A., Serpa, C., Arnaut, L. G., Ward, A. D., Karlsson, J. K. G., Atahan, A., Harriman, A., *The Photophysical Properties of Triisopropylsilyl-ethynylpentacene—A Molecule with an Unusually Large Singlet-Triplet Energy Gap—In Solution and Solid Phases*, *Chemistry*, 2, pp. 545-564, 2020.
DOI: 10.3390/chemistry2020033
27. Rocha, L. B., Soares, H. T., Mendes, M. I. P., Cabrita, A., Schaberle, F. A., Arnaut, L. G., *Necrosis depth and photodynamic threshold dose with redaporfin-PDT*, *Photochemistry and Photobiology*, 96: pp 692-698, 2020.
DOI: 10.1111/php.13256
28. Vinagreiro, C. S., Zangirolami, A., Schaberle, F. A., Nunes, S. C. C., Blanco, K. C., Inada, N. M., da Silva, G. J., Pais, A. A. C. C., Bagnato, V. S., Arnaut, L. G., Pereira, M. M., *Antibacterial Photodynamic Inactivation of Antibiotic-Resistant Bacteria and Biofilms with Nanomolar Photosensitizer Concentrations*, *ACS Infectious Diseases*, 6, pp 1517-1526, 2020.

DOI: 10.1021/acsinfecdis.9b00379

29. Gierlich, P., Mata, A. I., Donohoe, C., Brito, R. M. M., Senge, M. O., Gomes-da-Silva, L. C., *Ligand-Targeted Delivery of Photosensitizers for Cancer Treatment*. *Molecules*. 2020 Nov 14;25(22):5317.

DOI: 10.3390/molecules25225317

30. Gomes-da-Silva, L. C., Kepp, O., Kroemer, G., *Regulatory approval of photoimmunotherapy: photodynamic therapy that induces immunogenic cell death*. *Editorial on Oncoimmunology*. 2020 Oct 27;9(1):1841393.

DOI: 10.1080/2162402X.2020.1841393

31. Chaves, O. A., Acunha, T. V., Iglesias, B. A., Jesus, C. S. H., Serpa, C., *Effect of Peripheral Platinum(II) Bipyridyl Complexes on the Interaction of Tetra-Cationic Porphyrins with Human Serum Albumin*. *J. Mol. Liq.*, 301 (2020) 112166.

DOI: 10.1016/j.molliq.2020.112466

32. Silva, A. D., Henriques, C. A., Malva, D., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., Serpa, C., Arnaut, L. G., *Photoacoustic Generation of Intense and Broadband Ultrasound Pulses with Functionalized Carbon Nanotubes*, *Nanoscale*, 12, pp 20831-20839, 2020.

DOI: 10.1039/D0NR04986G

33. Arnaut, L. G., Ibáñez, S., *Self-sustained oscillations and global climate changes*, *Sci. Rep.*, 10 (2020) 11200

DOI: 10.1038/s41598-020-68052-9

34. Zangirolami, A. C., Dias, L. D., Blanco, K. C., Vinagreiro, C. S., Inada, N. M., Arnaut, L. G., Pereira, M. M., Bagnato, V. S., *Avoiding ventilator-associated pneumonia: Curcumin-functionalized endotracheal tube and photodynamic action*, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 117, pp 22967-22973, 2020.

DOI: 10.1073/pnas.2006759117

35. Pucelik, B., Sulek, A., Drozd, A., Stochel, G., Pereira, M. M., Pinto, S. M. A., Arnaut, L. G., Dąbrowski, J. M., *Enhanced Cellular Uptake and Photodynamic Effect with Amphiphilic Fluorinated Porphyrins: The Role of Sulfoester Groups and the Nature of Reactive Oxygen Species*, *Int. J. Mol. Sci.*, 21, 2786, 2020.

DOI: 10.3390/ijms21082786

36. Lobo, A. C. S., Gomes-da-Silva, L. C., Rodrigues-Santos, P., Cabrita, A., Santos-Rosa, M., Arnaut, L. G., *Immune responses after vascular photodynamic therapy with redaporfin*, *J. Clin. Med.*, 9 (2020) 104

DOI: 10.3390/jcm9010104

37. Pucelik, B., Arnaut, L. G., Dąbrowski, J. M., *Lipophilicity of bacteriochlorin-based photosensitizers as a determinant for PDT optimization through the modulation of the inflammatory mediators*, *J. Clin. Med.*, 9, 8, 2020.

DOI: 10.3390/jcm9010008

38. Ramilo-Gomes, F., António, J. P. M., Mendes, M. I. P., Gomes, R. F. A., *MedChemTrain e-School 2020: Event Highlights and Insights into Virtual Symposium Organization*, *ChemMedChem* 15 (2020) 2562-2568
DOI: 10.1002/cmdc.202000450
39. Eduardo, C., Ferreira-Gonçalves, T., Cardoso, M., Coelho, J. M. P., Gaspar, M. M., Faísca, P., Ascensão, L., *A Step Forward in Breast Cancer Research: From a Natural-Like Experimental Model to a Preliminary Photothermal Approach*, *International Journal of Molecular Sciences*, 21 (24), pp 9681-9681, 2020.
DOI: 10.3390/ijms21249681.
40. Duarte, S. C., Salvador, N., Machado, F., Costa, E., Almeida, A., Silva, L. J. G., Pereira, A. M. P. T., Lino, C., Pena, A., *Mycotoxins in teas and medicinal plants destined to prepare infusions in Portugal*. *Food Control*, 115, 107290, 2020.
DOI: 10.1016/j.foodcont. 2020.107290
41. Costa, E., Ferreira-Gonçalves, T., Chasqueira, G., Cabrita, A. S., Figueiredo, I. V., Reis, C. P., *Experimental Models as Refined Translational Tools for Breast Cancer Research*, *Scientia Pharmaceutica*, 88(3), 32, 2020.
DOI: 10.3390/scipharm88030032.
42. Dias, L. D., Rodrigues, F. M. S., Calvete, M. J. F., Carabineiro, S. A. C., Scherer, M. D., Caires, A. R. L., Buijnsters, J. G., Figueiredo, J. L., Bagnato, V. S., Pereira, M. M., *Porphyrin-Nanodiamond Hybrid Materials – Active, Stable and Reusable Cyclohexene Oxidation Catalysts*, *Catalysts*, 10, 1402, 2020.
DOI: 10.3390/catal10121402
43. Maldonado-Carmona, N., Marchand, G., Villandier, N., Ouk, T.-S., Pereira, M. M., Calvete, M. J. F., Calliste, C. A., Zak, A., Piksa, M., Pawlik, K. J., Matczyszyn, K., Leroy-Lhez, S., *Porphyrin-Loaded Lignin Nanoparticles Against Bacteria: A Photodynamic Antimicrobial Chemotherapy Application*, *Front Microbiol.*, 11, 606185, 2020.
DOI: 10.3389/fmicb.2020.606185
44. Damas, L., Rodrigues, F. M. S., Gonzalez, A. C. S., Carrilho, R. M. B., Pineiro, M., Pereira, M. M., *Sequential Catalytic Carbonylation Reactions for Sustainable Synthesis of Biologically Relevant Entities*, *J. Organomet. Chem.*, 923, 121417, 2020.
DOI: 10.1016/j.jorganchem.2020.121417
45. Vinagreiro, C. S., Lopes, R., Royo, B., Da Silva, G. J., Pereira, M. M., *Synthesis of Iron(II) N-Heterocyclic Carbene Complexes: Paving the Way for a New Class of Antibiotics*, *Molecules*, 25, 2917, 2020.
DOI: 10.3390/molecules25122917
46. Maldonado-Carmona, N., Ouk, T.-S., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., Villandier, N., Leroy-Lhez, S., *Conjugating biomaterials with photosensitizers: advances and perspectives for photodynamic antimicrobial chemotherapy*, *Photochem. Photobiol. Sci.*, 19, pp 445-461, 2020.
DOI: 10.1039/c9pp00398c

47. Gonzalez, A. C. S., Damas, L., Aroso, R. T., Tome, V. A., Dias, L. D., Pina, J., Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M., *Monoterpene-based metallophthalocyanines: sustainable synthetic approaches and photophysical studies*, *J. Porphyrins Phthalocyanines*, 24, pp 947-958, 2020.
DOI: 10.1142/S1088424620500066
48. Calvete, M. J. F., Pinto, S. M. A., Burrows, H. D., Castro, M. M. C. A., Geraldes, C. F. G. C., Pereira, M. M., *Multifunctionalization of cyanuric chloride for the stepwise synthesis of potential multimodal imaging chemical entities*, *Arab. J. Chem.*, 13, pp 2517-2525, 2020.
DOI: 10.1016/j.arabjc.2018.06.005
49. Rodrigues, F. M. S., Calvete, M. J. F., Monteiro, C. J. P., Carabineiro, S. A. C., Maria, T. M. R., Figueiredo, J. L., Pereira, M. M., *Hydroaminomethylation reaction as powerful tool for preparation of rhodium/phosphine functionalized nanomaterials. Catalytic evaluation in styrene hydroformylation*, *Catal. Today*, 356, pp 456-463, 2020.
DOI: 10.1016/j.cattod.2019.05.045
50. Dias, L. D., Veronese, J. M., Pereira, M. M., *Terapia Fotodinâmica e Educação no Combate à Resistência Bacteriana*, *Revista Anápolis Digital*, Vol. 11, pp. 61-80, 2020.
ISSN: 2178-0722.
51. Gonzalez, A. C. S., Aroso, R. T., Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M., *Sustainable Synthesis of Polymeric Materials Versus Fine Chemicals via CO₂ Addition to Epoxides*, *Chem. Proc.*, in press, 2020.
DOI: 10.3390/ecsoc-24-0835
52. Santos, F. M., Barbosa, P., Pereira, R., Silva, M. M., Gonçalves, H., Nunes, S. C., Figueiredo, F., Valente, A. J. M., Bermudez, V. Z., *Proton Conducting Electrolytes Composed of Chondroitin Sulfate Polysaccharide and Citric Acid*, *Eur. Polym. J.*, 124, pp 109453, 2020.
DOI: 10.1016/j.eurpolymj.2019.109453
53. Melro, E., Filipe, A., Sousa, D., Valente, A. J. M., Romano, A., Antunes, F. E., Medronho, B., *Dissolution of kraft lignin in alkaline solutions*, *Int. J. Biol. Macromol.*, 148, pp 688-695, 2020.
DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2020.01.153
54. Filova, B., Musilova, L., Mracek, A., Ramos, M. L., Veríssimo, L. M. P., Valente, A. J. M., Ribeiro, A.C.F. *Effect of sodium salts on diffusion of poly (vinyl alcohol) in aqueous solutions*, *J. Mol. Liq.*, 304, pp 112728, 2020.
DOI: 10.1016/j.molliq.2020.112728
55. Filho, C. M. C., Bueno, P. V. A., Matsushita, A. F. Y., Vilsinski, B. H., Rubira, A. F., Muniz, E. C., Murtinho, D. M. B., Valente, A. J. M., *Uncommon sorption mechanism of aromatic compounds onto poly (vinyl alcohol)/chitosan/maleic anhydride- β -cyclodextrin hydrogels*, *Polymers*, 12, pp 877, 2020.
DOI: 10.3390/polym12040877
56. Fernandes, T. C. D., Rodrigues, H. M. R., Paz, F. A. A., Sousa, J. F. M., Valente, A. J. M., Silva, M. M., Bermudez, V. Z., Pereira, R. F. P., *Highly Conducting Bombyx mori Silk Fibroin-based Electrolytes incorporating Glycerol, Dimethyl Sulfoxide and [Bmim]PF₆*. *J. Electrochem. Soc.*, 167, pp 070551, 2020.

DOI: 10.1149/1945-7111/ab8313

57. Gonçalves, H. M. R., Pereira, R. F. P., Lepleux, E., Pacheco, L., Valente, A. J. M., Duarte, A. J., Bermudez, V. Z., *Non-Newtonian Thermosensitive Nanofluid based on Carbon Dots Functionalized with Ionic Liquids, Small*, pp 1907661, 2020.

DOI: 10.1002/sml.201907661

58. Ramos, M., Beltrán, A., Fortunati, E., Peltzer, M. A., Cristofaro, F., Visai, L., Valente, A. J. M., Jiménez, A., Kenny, J. M., Garrigós, M. C., *Controlled release of thymol from poly(lactic acid)-based silver nanocomposite films with antibacterial and antioxidant activity, Antioxidants*, 9, pp 395, 2020.

DOI: 10.3390/antiox9050395

59. Bouzid, H., Filho, C. M. C., Marques, J. R. C., Valente, A. J. M., Gando-Ferreira, L. M., *A New Approach on the Amino Acid Lysine Quantification by UV-Visible Spectrophotometry, Rev. Chimie*, 71, pp 159-175, 2020.

DOI: 10.37358/Rev.Chim.1949

60. Matsushita, A. F. Y., Tapia, M. J., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M., *Luminescent properties of lanthanoid-poly (sodium acrylate) composites: insights on the interaction mechanism, Polymers*, 12, pp 1314, 2020.

DOI: 10.3390/polym12061314

61. Vareda, J. P., Valente, A. J. M., Durães, L., *Silica aerogels/xerogels modified with nitrogen-containing groups for heavy metal adsorption, Molecules*, 25, pp 2788, 2020.

DOI: 10.3390/molecules25122788

62. Mohit Sharma, M., Aguado, R., Murtinho, D., Valente, A. J. M., Sousa, A. P. M., Ferreira, P. J. T., *A review on cationic starch and nanocellulose as paper coating components, Int. J. Biol. Macromol.*, 162, pp 578-598, 2020.

DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2020.06.131

63. Sato, T., Mello, D., Vasconcelos, L., Valente, A. J. M., Borges, A., *Chitosan-Based Coacervate Polymers for Propolis Encapsulation: Release and Cytotoxicity Studies, Int. J. Mol. Sci.*, 21, pp 4561, 2020.

DOI: 10.3390/ijms21124561

64. Ramos, M. L., Dias, D. C., Justino, L. L. G., Verissimo, L. M. P., Valente, A. J. M., Estes, M. A., Ribeiro, A. C. F., Leaist, D. G., Pina, J., Cabral, A. M. T. D. P. V., Rodrigo, M. M., *Interactions between glycyl-L-phenylalanine and β -cyclodextrin from diffusion, spectroscopic and computational studies, J. Mol. Liq.*, 315, pp 113704, 2020.

DOI: 10.1016/j.molliq.2020.113704

65. Scermino, L., Fabozzi, A., De Tommaso, G., Valente, A. J. M., Iuliano, M., Paduano, L., D'Errico, G., *pH-responsive micellization of an amine oxide surfactant with branched hydrophobic tail, J. Mol. Liq.*, 316, pp 113799, 2020.

DOI: 10.1016/j.molliq.2020.113799

66. Encarnaç o, T., Palito, C., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M., Burrows, H. D., *Removal of pharmaceuticals from water by free and immobilised microalgae*, *Molecules*, 25, pp 3639, 2020.
DOI: 10.3390/molecules25163639

67. Ramos, M., Fortunati, E., Beltr n, A., Peltzer, M., Cristofaro, F., Visai, L., Valente, A. J. M., Jim nez, A., Kenny, J. M., Garrig s, M. C., *Controlled release, disintegration, antioxidant, and 2 antimicrobial properties of Poly (lactic 3 acid) / thymol / nanoclay composites*, *Polymers*, 12, pp 1878, 2020.
DOI: 10.3390/polym12091878

68. Melro, E., Filipe, A., Valente, A. J. M., Antunes, F. E., Romano, A., Norgren, M., Medronho, B., *Levulinic acid: a novel sustainable solvent for lignin dissolution*, *Int. J. Biol. Macromol.*, 164, pp 3454-3461, 2020.
DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2020.08.1281.

69. Galindres, D. M., Ribeiro, A. C. F., Estes, M. A., Vargas, E. F., Leaist, D. G., Rodrigo, M. M., *The effects of sodium chloride on the diffusion of sulfonated resorcinarenes in aqueous solutions*, *Fluid Phase. Equilib.*, 518, pp 112629, 2020.
DOI:10.1016/j.fluid.2020.112629

70. Aguiar, A., Farinhas, J., Silva, W., Susano, M., Silva, M. R., Alcacer, L., Kumar, S., Brett, C. M. A., Morgado, J., Sobral, A. J. F. N., *Simple BODIPY dyes as suitable electron-donors for organic bulk heterojunction photovoltaic cells*, *Dyes and Pigments*, 172, pp 107842, 2020.
DOI: 10.1016/j.dyepig.2019.107842

71. Krishnakumar, B., Ravikumar, S., Pandiyan, V., Nithya, V., Sylvestre, S., Sivakumar, P., Surya, C., John, N. A. A., Sobral, A. J. F. N., *Synthesis, characterization of porphyrin and CdS modified spherical shaped SiO₂ for Reactive Red 120 degradation under direct sunlight*, *Journal of Molecular Structure*, Accepted for publication (MOLSTR 128021) 2020
DOI: 10.1016/j.molstruc.2020.128021

72. Encarnaç o, T., Aguiar, A., Palito, C., Pais, A. C. C., Campos, M. G., Sobral, A. J. F. N., Burrows, H. D., *Development and validation of a RP-HPLC method for the simultaneous analysis of paracetamol, ibuprofen, olanzapine, and simvastatin during microalgae bioremediation*, *MethodsX* 7, pp 101083, 2020.
DOI: 10.1016/j.mex.2020.101083

73. Teodoro, J. S., Silva, R., Aguiar, A., Sobral, A. J. F. N., Rolo, A. P., Palmeira, C. M., *Exploration of the cellular effects of the high-dose, long-term exposure to coffee roasting product furan and its by-product cis-2-butene-1,4-dial on human and rat hepatocytes*, *Toxicology Mechanisms and Methods*, Accepted for Publication, 2020
DOI: 10.1080/15376516.2020.1780361

74. Pinheiro, D., Pineiro, M., Pina, J., Brand o, P., Galv o, A. M., Seixas de Melo, J. S., *Tryptanthrin from Indigo: Synthesis, Excited State Deactivation Routes and Efficient Singlet Oxygen Sensitization*, *Dyes Pigm.*, 175, pp 108125-108135, 2020.
DOI: 10.1016/j.dyepig.2019.108125

75. Pinar, E. D., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *A Water-Soluble Bithiophene with Increased Photoluminescence Efficiency and Metal Recognition Ability*, *Dalton Trans*, 49, pp 12319-12326, 2020.

DOI: 10.1039/D0DT01385D

76. Ferreira, J. T., Pina, J., Ribeiro, C. A. F., Fernandes, R., Tome, J. P. C., Rodriguez-Morgade, M. S., Torres, T., *Highly Efficient Singlet Oxygen Generators Based on Ruthenium Phthalocyanines: Synthesis, Characterization and in vitro Evaluation for Photodynamic Therapy*, *Chem. Eur. J.*, 26, pp 1789-1799, 2020.

DOI: 10.1002/chem.201903546

77. Gonzalez, A. C. S., Damas, L., Aroso, R. T., Tome, V. A., Dias, L. D., Pina, J., Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M., *Monoterpene-based metallophthalocyanines: Sustainable synthetic approaches and photophysical studies*, *J. Porphyr. Phthalocyanines*, 24, pp 947-958, 2020.

DOI: 10.1142/s1088424620500066

78. Lazaro, A., Cunha, C., Bosque, R., Pina, J., Ward, J. S., Truong, K. N., Rissanen, K., Lima, J. C., Crespo, M., Seixas de Melo, J. S., Rodriguez, L., *Room-Temperature Phosphorescence and Efficient Singlet Oxygen Production by Cyclometalated Pt(II) Complexes with Aromatic Alkynyl Ligands*, *Inorg. Chem.*, 59, pp 8220-8230, 2020.

DOI: 10.1021/acs.inorgchem.0c00577

79. Pina, J., Rodrigues, A. C. B., Alnady, M., Dong, W. Y., Scherf, U., Seixas de Melo, J. S., *Restricted Aggregate Formation on Tetraphenylethene-Substituted Polythiophenes*, *J. Phys. Chem. C*, 124, pp 13956-13965, 2020.

DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b10908

80. Rodrigues, A. C. B., Geisler, I. S., Klein, P., Pina, J., Neuhaus, F. J. H., Dreher, E., Lehmann, C. W., Scherf, U., Seixas de Melo, J. S., *Designing highly fluorescent, arylated poly(phenylene vinylene)s of intrinsic microporosity*, *J. Mat. Chem. C*, 8, pp 2248-2257, 2020.

DOI: 10.1039/c9tc06028f

81. Rodrigues, A. C. B., Pina, J., Seixas de Melo, J. S., *Structure-relation properties of N-substituted phenothiazines in solution and solid state: Photophysical, photostability and aggregation-induced emission studies*, *J. Mol. Liq.*, 317, pp 113966, 2020.

DOI: 10.1016/j.molliq.2020.113966

82. Rodrigues, A. I., Krishnamoorthy, P., Gomes, C. S. B., Carmona, N., Di Paolo, R. E., Pander, P., Pina, J., Seixas de Melo, J. S., Dias, F. B., Calhorda, M. J., Maçanita, A. L., Morgado, J., Gomes, P. T., *Luminescent halogen-substituted 2-(N-arylimino)pyrrolyl boron complexes: the internal heavy-atom effect*. *Dalton Transactions*, 49, pp 10185-10202, 2020.

DOI: 10.1039/d0dt01845g

83. Gonzalez, A. C. S., Damas, L., Aroso, R. T., Tomé, V. A., Dias, L. D., Pina, J., Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M., *Monoterpene-based metallophthalocyanines: Sustainable synthetic approaches and photophysical studies*. *Journal of Porphyrins and Phthalocyanines*, 24, pp 947-958, 2020.

DOI: 10.1142/s1088424620500066

84. Guimarães, M. N., de Almeida, M. M., Marques, J. M. C., Prudente, F. V., *A Thermodynamic View on the Microsolvation of Ions by Rare Gas: Application to Li⁺ with Argon*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 22, pp 10882-10892, 2020.
DOI: 10.1039/D0CP01283A
85. Marques, J. M. C., Martínez-Núñez, E., Hase, W. L., *Editorial: Application of Optimization Algorithms in Chemistry*, *Frontiers in Chemistry*, 8, pp 198, 2020.
DOI: 10.3389/fchem.2020.00198
86. Mendes, M., Cova, T., Basso, J., Ramos, M. L., Vitorino, R., Sousa, J., Pais, A. A. C. C., Vitorino, C., *Hierarchical design of hyaluronic acid-peptide constructs for glioblastoma targeting: Combining insights from NMR and molecular dynamics simulations*, *J. Mol. Liquids*, 315, pp. 113774, 2020.
DOI: 10.1016/j.molliq.2020.113774
87. Sajadimajd, S., Bahramsoltani, R., Iranpanah, A., Kumar, P. J., Das, G., Gouda, S., Rahimi, R., Rezaei-amiri, E., Cao, H., Giampieri, F., Battino, M., Tundis, R., Campos, M. G., Farzaei, M. H., Xiao, J., *Advances on Natural Polyphenols as Anticancer Agents for Skin Cancer*, *Pharmacological Research*.151, 2020
DOI: 10.1016/j.phrs.2019.104584
88. Saboor, A., Campos, M. G., Filippo, F., Solomon, Z., Altaye, Jianke, L., *New insights into the biological and pharmaceutical properties of royal jelly*. *International Journal of Molecular Sciences*, *Int. J. Mol. Sci.* 2020, 21, pp 382-408 ,2020.
DOI: 10.3390/ijms21020382
89. Haroon, K., Ullah, H., Tundis, R., Belwal, T., Devkota, H. P., Daglia, M., Saygili, I., Cetin, Z., Campos, M. G., Capanoglu, E., Baiyi, L. B., Hui, C. H., Jianbo, Xi. J., *Flavonoids in the treatment of Huntington's disease: Mechanism and clinical perspective*, *eFood*, 1(1): pp38–52, 2020
DOI: 10.2991/efood.k.200203.001, eISSN 2666-3066
90. Aguirre, A. C., Esteso, M. A., Maldonado, M., *Resorcin[4]arenes: Generalities and their role in the modification and detection of amino acids*, *Current Organic Chemistry* 24, pp 1–15, 2020.
DOI: 10.2174/1385272824999200510232141.
91. Fernandes, S, Nogueira, V, Antunes, F, Lopes, I, Pereira, R, *Studying the toxicity of SLEnS-LAS micelles to collembolans and plants: Influence of ethylene oxide units in the head groups*. *Journal of hazardous materials*, 394, pp 122522, 2020.
92. Filipe, H., Esteves, A. L., Margarida, I. M., Henriques, C. A., Antunes, F. E., *Effect of Protein Flexibility from Coarse-Grained Elastic Network Parameterizations on the Calculation of Free Energy Profiles of Ligand Binding*. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 16, 7, pp 4734-4743, 2020.
93. Milcovich, G., Antunes, F. E., Grassi, M., Asaro, F., *Soft Nanoions: A Dynamic Overview onto Catanionic Vesicles Temperature-Driven Transition*, *Int. J. Mol. Sci.*, 21, pp 6804, 2020.

94. Melro, E., Antunes, F., Cruz, I. Ramos, P. E., Philippe, E., Carvalho, F., Alves, L., "Morphological, textural and physico-chemical characterization of processed meat products during their shelf life", *Food Structure*, 26, pp 100164, 2020.
95. Melro, E., Antunes, F. E., Silva, G. J., Cruz, I., Ramos, P. E., Carvalho, F., Alves, L., Chitosan Films in Food Applications. Tuning Film Properties by Changing Acidic Dissolution Conditions, *Polymers*, pp 13, 1, 1, 2020.
96. Pereira, J. C., Zarzycki, P. K., *Smart Sampling and Probing: Are You Getting All the Relevant Information?*, *Journal of AOAC INTERNATIONAL*, 103 (2), pp 456-469, 2020.
DOI: 10.5740/jaoacint.19-0269
97. Silva, F. A. L. S., Neves, B. M., Rosete, M. T. C., Pereira, J. C., *Evaluating skin sensitization via soft and hard multivariate modeling*, *International Journal of Toxicology*, pp 547-559, 2020.
DOI: 10.1177/1091581820944395
98. Basso, J., Mendes, M., Silva, J., Sereno, J., Cova, T., Oliveira, R., Fortuna, A., et al., *Peptide-lipid nanoconstructs act site-specifically towards glioblastoma growth impairment*, *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics* 155, pp 177-189., 2020.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.ejpb.2020.08.015>.
99. Mendes, M., Basso, J., Silva, J., Cova, T., Sousa, J., Pais, A., Vitorino, C., *Biomimeting ultra-small lipid nanoconstructs for glioblastoma treatment: A computationally guided experimental approach*, *International Journal of Pharmaceutics* 587, pp 119661, 2020.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.ijpharm.2020.119661>.
100. Encarnação, T., Aguiar, A., Palito, C., Pais, A. A. C. C., Campos, Maria G., Sobral, A. J. F. N., Burrows, H. D., *Development and validation of a RP-HPLC method for the simultaneous analysis of paracetamol, ibuprofen, olanzapine, and simvastatin during microalgae bioremediation*, *MethodsX*, pp 101083, 2020
<http://dx.doi.org/10.1016/j.mex.2020.101083>.
101. Mendes, M., Cova, T., Basso, J., Ramos, M. L., Vitorino, R., Sousa, J., Pais, A. A. C. C., Vitorino, C., *Hierarchical design of h yaluronic acid-peptide constructs for glioblastoma targeting: Combining insights from NMR and molecular dynamics simulations*, *Journal of Molecular Liquids* pp 113774, 2020
<http://dx.doi.org/10.1016/j.molliq.2020.113774>.
102. Matsushita, A. F. Y., Tapia, M. J., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M., *Luminescent Properties of Lanthanoid-Poly(Sodium Acrylate) Composites: Insights on the Interaction Mechanism*, *Polymers* 12 6, pp 1314, 2020.
<http://dx.doi.org/10.3390/polym12061314>.
103. Vinagreiro, C. S., Zangirolami, A., Schaberle, F. A., Nunes, S. C. C., Blanco, K. C., Inada, N. M., da Silva, G. J., *Antibacterial Photodynamic Inactivation of Antibiotic-Resistant Bacteria and Biofilms with Nanomolar Photosensitizer Concentrations*, *ACS Infectious Diseases* 6 6 (2020): 1517-1526.

<http://dx.doi.org/10.1021/acsinfecdis.9b00379>.

104. Ferreira, M., Sousa, J., Pais, A., Vitorino, C., *The Role of Magnetic Nanoparticles in Cancer Nanotheranostics*, *Materials* 13 2 (2020): 266.

<http://dx.doi.org/10.3390/ma13020266>.

105. Basso, J., Mendes, M., Silva, J., Cova, T., Luque-Michel, E., Jorge, A. F., Grijalvo, S., *Sorting hidden patterns in nanoparticle performance for glioblastoma using machine learning algorithms*, *International Journal of Pharmaceutics*, pp 120095, 2020.

<http://dx.doi.org/10.1016/j.ijpharm.2020.120095>.

106. Vitorino, R., Guedes, S., Vitorino, C., Ferreira, R., Amado, F., Eyk, V., Jennifer, E., *Elucidating Citrullination by Mass Spectrometry and its role in Disease Pathogenesis*, *Journal of Proteome Research*, 2020.

<http://dx.doi.org/10.1021/acs.jproteome.0c00474>.

107. Simões, A., Miranda, M., Cardoso, C., Veiga, F., Vitorino, C., *Rheology by Design: A Regulatory Tutorial for Analytical Method Validation*, *Pharmaceutics* 129, pp 820-820, 2020.

<https://doi.org/10.3390/pharmaceutics12090820>.

108. Henriques, J., Schaberle, F. A., Serpa, C., Pais, A. A. C. C., Cardoso, C., Vitorino, C., *Photoacoustic method for real-time assessment of salt content in aqueous solutions*, *Talanta*, pp 121497, 2020.

<http://dx.doi.org/10.1016/j.talanta.2020.121497>.

109. Vitorino, C., Silva, S., Gouveia, F., Bicker, J., Falcão, A., Fortuna, A., *QbD-driven development of intranasal lipid nanoparticles for depression treatment*, *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics* 153, pp 106-120, 2020.

<http://dx.doi.org/10.1016/j.ejpb.2020.04.011>.

110. Simões, A., Veiga, F., Vitorino, C., *Progressing Towards the Sustainable Development of Cream Formulations*, *Pharmaceutics* 127, pp 647, 2020.

<http://dx.doi.org/10.3390/pharmaceutics12070647>.

111. Miranda, M., Cardoso, C., Vitorino, C., *Fast Screening Methods for the Analysis of Topical Drug Products*, *Processes* 8 4 (2020): 397.

<http://dx.doi.org/10.3390/pr8040397>.

112. Gonçalves, J., Alves, G., Carona, A., Bicker, J., Vitorino, C., Falcão, A., Fortuna, A., *Pre-Clinical Assessment of the Nose-to-Brain Delivery of Zonisamide After Intranasal Administration*, *Pharmaceutical Research* 374, 2020.

<http://dx.doi.org/10.1007/s11095-020-02786-z>.

113. Miranda, M., Cova, T., Augusto, C., Pais, A. A. C. C., Cardoso, C., Vitorino, C., *Diving into Batch-to-Batch Variability of Topical Products-a Regulatory Bottleneck, Pharmaceutical Research* 3711 (2020).
<http://dx.doi.org/10.1007/s11095-020-02911-y>
114. Adão, R., Cruz, P. F., Vaz, D. C., Fonseca, F., Pedersen, J. N., Ferreira-da-Silva, F., Brito, R. M. M., Ramos, C. H. I., Otzen, D., Keller, S., Bastos, M., *DIBMA nanodiscs keep α -synuclein folded, Biochim. Biophys. Acta Biomembr.*, 1862, 183314, 2020.
DOI: 10.1016/j.bbamem.2020.183314
115. Almeida, Z. L., Brito, R. M. M., *Structure and Aggregation Mechanisms in Amyloids, Molecules*, 25, 1195, 2020.
DOI: 10.3390/molecules25051195
116. Alves, N. G, Mata, A. I., Luís, J. P., Brito, R. M. M., Simões, C. J. V., *An Innovative Sequence-to-Structure-Based Approach to Drug Resistance Interpretation and Prediction: The Use of Molecular Interaction Fields to Detect HIV-1 Protease Binding-Site Dissimilarities, Front. Chem.*, 8, 243, 2020.
DOI: 10.3389/fchem.2020.00243
117. Atanasova, I., Sojoodi, M., Leitao, H. S., Shuvaev, S., Geraldes, C. F. G. C., Masia, R., Guimaraes, A. S., Tanabe, K. K., Fuchs, B. C., Caravan, P., *Molecular Magnetic Resonance Imaging of Fibrin Deposition in the Liver as an Indicator of Tissue Injury and Inflammation, Invest. Radiol.*, 55, pp 209-216, 2020.
DOI: 10.1097/RLI.0000000000000631
118. Bornes, C., Amelse, J., Peacock, M., Marshall, C. L., Schwartz, M., Geraldes, C. F. G. C., Rocha, J., Mafra, L., *Quantification of Brønsted Acid Sites in Zeolites by Water Desorption Thermogravimetry, Eur. J. Inorg. Chem.*, 1860–1866, 2020.
DOI: 10.1002/ejic.202000050
109. Calvete, M. J. F., Pinto, S. M. A., Burrows, H. D., Castro, M. M. C. A., Geraldes, C. F. G. C., Pereira M. M., *Multifunctionalization of cyanuric chloride for the stepwise synthesis of multimodal imaging agents with porphyrin and aminocarboxylate aza-chelate sensing arms, Arab. J. Chem.*, 13, pp 2517-2525, 2020.
DOI: 10.1016/j.arabjc.2018.06.005
110. Cardoso, R. M. S., Martins, P. A. T., Leote, R. J. B., Razi Naqvi, K., Vaz, W. L. C., Moreno, M. J., *Effect of dipole moment on amphiphile solubility and partition into liquid ordered and liquid disordered phases in lipid bilayers, BBA-Biomembranes*, 1862, 183157, 2020.
DOI: 10.1016/j.bbamem.2019.183157
111. Coreta-Gomes, F. M., Lopes, G. R., Passos, C. P., Vaz, I. M., Machado, F., Geraldes, C. F. C., Moreno, M. J., Nystrom, L., Coimbra, M. A., *In Vitro Hypocholesterolemic Effect of Coffee Compounds, Nutrients*, 12, 437, 2020.
DOI: 10.3390/nu12020437

112. Filipe, H. A. L., Moreno, M. J., Loura, L. M. S., *The Secret Lives of Fluorescent Membrane Probes as Revealed by Molecular Dynamics Simulations*, *Molecules*, 25, 3424, 2020. (Feature Paper)
DOI: 10.3390/molecules25153424
113. Frangolho, A., Correia, B. E., Vaz, D. C., Almeida, Z. L., Brito, R. M. M., *Oligomerization Profile of Human Transthyretin Variants with Distinct Amyloidogenicity*, *Molecules*, 25, 5698, 2020.
DOI: 10.3390/molecules25235698
114. Geraldes, C. F. G. C., *Introduction to Infrared and Raman-Based Biomedical Molecular Imaging and Comparison with Other Modalities*, *Molecules*, 25, 5547, 2020.
DOI: 10.3390/molecules25235547
115. Martinez-Calle, M., Prieto, M., Olmeda, B., Fedorov, A., Loura, L. M. S., Perez-Gil, J., *Pulmonary surfactant protein SP-B nanorings induce the multilamellar organization of surfactant complexes*, *BBA-Biomembranes*, 1862, 183216, 2020.
DOI: 10.1016/j.bbamem.2020.183216
116. Mulas, G., Rolla, G. A., Geraldes, C. F. G. C., Starmans, L. W. E., Botta, M., Terreno, E., Tei, L., *Mn(II)-based lipidic nanovesicles as high efficiency MRI probes*, *ACS Appl. Bio Mater.*, 3, pp 2401–2409, 2020.
DOI: 10.1021/acsabm.0c00138
117. Peskin, A. V., Meotti, F. C., de Souza, L. F., Anderson, R. F., Winterbourn, C. C., Salvador, A., *Intra-dimer cooperativity between the active site cysteines during the oxidation of peroxiredoxin 2*, *Free Radical Biology and Medicine*, 158, pp 115–125, 2020.
DOI: 10.1016/j.freeradbiomed.2020.07.007
118. Peters, J. A., Djanashvili, K., Geraldes, C. F. G. C., Platas Iglesias, C., *The chemical consequences of the gradual decrease of the ionic radius along the Ln-series*, *Coord. Chem. Rev.*, 406, 213146, 2020.
DOI: 10.1016/j.ccr.2019.213146
119. Ratnakar, S. J., Chirayil, S., Funk, A. M., Zhang, S. R., Queiro, J. F., Geraldes, C. F. G. C., Kovacs, Z., Sherry, A. D., *A Frequency-Selective pH-Responsive paraCEST Agent*, *Angew Chem Int Ed Engl.*, 59, pp 21671–21676, 2020.
DOI: 10.1002/anie.202008888
120. Rodrigues, E. T., Nascimento, S. F., Moreno, M. J., Oliveira, P. J., Pardal, M. A., *Rat cardiomyocyte H9c2(2-1)-based sulforhodamine B assay as a promising in vitro method to assess the biological component of effluent toxicity*, *J. Environmental Sci.*, 96, pp 163-170, 2020.
DOI: 10.1016/j.jes.2020.04.029
121. Rosário-Ferreira, N., Preto, A. J., Melo, R., Moreira, I. S., Brito, R. M. M., *The Central Role of Non-Structural Protein 1 (NS1) in Influenza Biology and Infection*. *Int. J. Mol. Sci.*, 21, 1511, 2020.
DOI: 10.3390/ijms21041511

122. Silva, F., Paulo, A., Pallier, A., Meme, S., Tóth, E., Gano, L., Marques, F., Geraldés, C. F. G. C., Castro, M. M. C. A., Cardoso, A. M., Jurado, A. S., Lopez-Larrubia, P., Lacerda, S., Campello, M. P. C., *Dual imaging gold nanoplatfoms for targeted radiotheranostics*, *Materials*, 13, 513, 2020.

DOI: 10.3390/ma13030513

123. Vaz-Ramos, J., Cordeiro, R., Castro, M. M. C. A., Geraldés, C. F. G. C., Costa, B. F. O., Faneca, H., Durães, L., *Supercritically dried superparamagnetic mesoporous silica nanoparticles for cancer theranostics*, *Mater. Sci. Eng. C Mater. Biol. Appl.*, 115, 111124, 2020.

DOI: 10.1016/j.msec.2020.111124

124. Alves, A. J. S. Alves, N. G., Caratão, C. C., Esteves, M. I. M., Fontinha, D., Bártolo, I., Soares, M. I. L., Lopes, S. M. M., Prudêncio, M., Taveira, N., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Spiro-Lactams as Novel Antimicrobial Agents*, *Curr. Top. Med. Chem.*, 20, pp 140-152, 2020.

Published as part of a Special Issue on "New Developments in the Medicinal Chemistry Targeting Drug-Resistant Infection".

DOI: 10.2174/1568026619666191105110049

125. Soares, M. I. L., Lopes, S. M. M., Murtinho, D., Pinho e Melo, T. M. V. D., *One-pot Diastereoselective Synthesis of Chiral Tricyclic L-Cysteine and D-Penicillamine Derivatives: A Laboratory Experiment*, *Quim. Nova*, 43, pp 123-126, 2020.

DOI: 10.21577/0100-4042.20170448

126. Lopes, S. M. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Meso-Substituted Corroles from Nitrosoalkenes and Dipyrrromethanes*. *J. Org. Chem.*, 85 (5), pp 3328-3335, 2020.

DOI: 10.1021/acs.joc.9b03151

127. Lopes, S. M. M., Pineiro, M., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Corroles and Hexaphyrins: Synthesis and Application in Cancer Photodynamic Therapy*. *Molecules*, 25 (15), pp 3450, 2020.

DOI: 10.3390/molecules25153450.

128. Brandão, P., Pinheiro, D., Seixas de Melo, J. S., Pineiro, M., *I₂/NaH/DMF as Oxidant Trio for the Synthesis of Tryptanthrin from Indigo or Isatin Dyes and Pigments*, 173, pp 107935-107939, 2020.

DOI: 10.1016/j.dyepig.2019.107935

129. Gomes, C. Vinagreiro, C. , Damas, L., Aquino, G., Quaresma, J., Chaves, C., Pimenta, J., Campos, J., Pereira, M., Pineiro, M., *Advanced Mechanochemistry Device for Sustainable Synthetic Processes*, *ACS Omega*, 5, pp 10868–10877, 2020.

DOI: 10.1021/acsomega.0c00521

130. Laranjo, M., Aguiar, M. C., Pereira, N. A., Brites, G., Nascimento, B. F., Brito, A. J., Casalta-Lopes, Gonçalves, A. C., Sarmiento-Ribeiro, A. B., Pineiro, M. Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Platinum(II) Ring-Fused Chlorins as Efficient Theranostic Agents: Dyes for Tumor-Imaging and Photodynamic Therapy of Cancer*, *Eur. J. Med. Chem.* 200, 112468, 2020.

DOI: 10.1016/j.ejmech.2020.112468

131. Pineiro, M., Burke, A. J., Brandão, P., *A Decade of Indium-Catalyzed Multicomponent Reactions (MCRs)*, *Eur. J. Org. Chem.*, 2020, in press.
DOI: 10.1002/ejoc.202000596
132. Félix, A. R. G., Simões, P. R. D., Sousa, F. J. P. M., Serra, M. E. S., Murtinho, D., *Chiral Thiazolidine based Organocatalysts: Synthesis and Application in Asymmetric Aldol Reactions*, *Lett. Org. Chem.*, 17, pp 372–380, 2020.
DOI: 10.2174/2210681209666190807155816
133. Pires, A. S., Batista, J., Murtinho, D., Nogueira, C., Karamysheva, A., Ramos, M. L. , Milne, B.F., Tavares, N.T., Gonçalves, A.C., Abrantes, A.M., Soares, R., Gonçalves, T., Botelho, M. F., Serra, M.E.S., *Synthesis, Characterization and Evaluation of the Antibacterial and Antitumor Activity of Halogenated Salen Copper (II) Complexes derived from Camphoric Acid*, *Appl. Organomet. Chem.*, 34, e5569, 2020.
DOI: 10.1002/aoc.5569
134. Alves, C., Grosso, C., Barrulas, P., Paixão, J. A., Cardoso, A. L., Burke, A. J., Lemos, A., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Asymmetric Neber Reaction in the Synthesis of Chiral 2-(Tetrazol-5-yl)-2H-Azirines*, *Synlett*, 31(06), pp 553-558, 2020.
DOI: 10.1055/s-0039-1691533
135. Alves, A. J. S., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Synthesis of Novel Chiral Spiroisoxazolidine- β -Lactams from 6-Alkylidenepenicillanates: A 1,3-Dipolar Cycloaddition Approach*, *Eur. J. Org. Chem.*, pp 6259-6269, 2020.
DOI: 10.1002/ejoc.202001085
136. Ferreira, E., Real, F. C., Pinho e Melo, T. M. V. D., Margalho, C., *A Novel Bioanalytical Method for the Determination of Opioids in Blood and Pericardial Fluid*, *J. Anal. Toxicol.*, 44, pp 754-768, 2020.
DOI: 10.1093/jat/bkaa064
137. Varandas, A. J. C., *Canonical versus explicitly correlated coupled cluster: Post-complete-basis-set extrapolation and the quest of the complete-basis-set limit*, *International Journal of Quantum Chemistry* 121, Article e26598, 2021 (First published: 29 December 2020).
DOI: 10.1002/qua.26598
138. Quattrociochi, D. G. S., de Oliveira, A. R., Carneiro, J. W. M., Rocha, C. M. R., Varandas, A. J. C., *MP2 versus density functional theory calculations in CO₂-sequestration reactions with anions: Basis set extrapolation and solvent effects*, *International Journal of Quantum Chemistry* 121, Article e26583, 2021 (Early Access: December 2020)
DOI: 10.1002/qua.26583
139. Varandas, A. J. C., *Extrapolation in quantum chemistry: Insights on energetics and reaction dynamics*, *Journal of Theoretical & Computational Chemistry* 19, Article 2030001, 2020.
DOI: 10.1142/S0219633620300013
140. Mondal, T., Varandas, A. J. C., *Effect of initial vibrational excitation on the methane cation sub-femtosecond photodynamics*, *Molecular Physics* 118, 2020.

DOI: 10.1080/00268976.2020.1752403

141. Varandas, A. J. C., da Providencia, J., da Providencia, J. P., *Binding of muonated hydrogen molecules and Born-Oppenheimer approximation revisited, Canadian Journal of Physics* 98, 379-384, 2020.

DOI: 10.1139/cjp-2019-0061

142. Mota, V. C., Galvao, B. R. L., Coura, D. V. B., Varandas, A. J. C., *Accurate Potential Energy Surface for Quartet State HN₂ and Interplay of N(S-4) plus NH(X-3 Sigma(-)) versus H+N 2(A(3)Sigma(+)(u)) Reactions, Journal of Physical Chemistry A* 124, 781-789, 2020.

DOI: 10.1021/acs.jpca.9b09467

143. Rocha, C. M. R., Varandas, A. J. C., *A general code for fitting global potential energy surfaces via CHIPR method: Triatomic molecules, Computer Physics Communications*, 247, Article 106913, 2020.

DOI: 0.1016/j.cpc.2019.106913

144. Martinez Gonzalez, M., Xavier, F. G. D., Li, J., Montero-Cabrera, L. A., Garcia de la Vega, J. M., Varandas, A. J. C., *Role of Augmented Basis Sets and Quest for ab Initio Performance/Cost Alternative to Kohn-Sham Density Functional Theory, Journal Of Physical Chemistry A*, 124, 126-139, 2020.

DOI: 10.1021/acs.jpca.9b09504

145. Varandas, A. J. C., Pansini, Fernando N. N., *Optimal diffuse augmented atomic basis sets for extrapolation of the correlation energy, International Journal of Quantum Chemistry* 120, Article e26135, 2020.

DOI: 10.1002/qua.26135

146. Gaudêncio, J., Rodrigues, S. P. J., Martins, D. R., *Indígenas brasileiros e o uso das plantas: saber tradicional, cultura e etnociência, Khronos - Revista de História da Ciência* 9, 163-182, 2020.

DOI: 10.11606/khronos.v0i9.171134

147. Gaudêncio, J., Rodrigues, S. P. J., Silveira, R. M. C. F., Martins, D. R., *Etnociência Kaingang: uma revisão sistemática de literatura, Cadernos do Ceom* 33, 157-171, 2020.

DOI: 10.22562/2020.53.12

ARTIGOS PUBLICADOS EM REVISTAS NACIONAIS COM REVISÃO POR PARES

1. Martins, G., Antunes, F., Batista, S., Malça, C., Santos, C., *Materiais compósitos madeira-plástico para soluções arquitetônicas ambientalmente sustentáveis, Construção Magazine*, 97, pp 13-17, 2020.

COMUNICAÇÕES APRESENTADAS EM REUNIÕES CIENTÍFICAS

Lições Plenárias, Comunicações e Pósteres Apresentados em Reuniões Científicas Internacionais

1. Fausto, R., *Matrix Isolation and IR-Induced Chemistry: A Matter of Selectivity*, Virtual Meeting on “Molecular Structure – Techniques to Resolve (MSTR-2020)”, United Scientific Group, San Francisco, USA, 2020. **Lição plenária**

2. Arnaut, L. G., “*Redaporfin-PDT in Advanced Head and Neck Cancer: Preliminary results and considerations for further progress*” Photodynamic Therapy and Photodiagnosis Update, 5-6/11/2020, online from Munich (Germany).

Invited Lecture

3. Arnaut, L. G., “*Photodynamic Therapy: Opportunities in Oncology and Infectious Diseases*” 45th International Nathiagali Summer College, 20-25/07/2020, online from Islamabad (Pakistan).

Invited Lecture

4. Arnaut, L. G., “*Electron Transfers: Higher activation barriers can lift exothermic rate restrictions and enable faster rates*” Webinar online 03/06/2020 from the University of Uppsala (Sweden).

Invited Lecture

5. Pereira, M. M., *Cationic Imidazolyl Photosensitizers - Highly Efficient Molecules for Photodynamic Inactivation of Multidrug-resistant Bacteria and Biofilms*, 11th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines - ICPP-11, Buffalo, USA, 2020. **Lição convidada**

6. Rodrigues, F. M. S., Piccirillo, G., Dias, L. D., Carrilho, R. M. B., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., *Organic/Inorganic hybrid materials for catalytic applications*, Materials Science Virtual 2020, online, 2020. **Comunicação oral**

7. Gonzalez, A. C. S., Aroso, R. T., Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M., *Sustainable Synthesis of Polymeric Materials Versus Fine Chemicals via CO₂ Addition to Epoxides*, The 24th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry, online, 2020. **Comunicação oral**

8. Valente, A. J. M., *Gel Matrices for Pollutants Removal*, Workshop on “Advanced materials for water and soil protection and wastewater purification”, National Research and Development Institute for Chemistry and Petrochemistry ICECHIM, Bucharest, Romania. 02.03.2020. **Comunicação Convidada**

9. Caeiro, A., Correia, S., Canhoto, J., Campos, M. G., Study of secondary metabolites and photosynthetic pigments in Tamarillo (*Solanum betaceum* Cav.) leaves 4^o Encontro. Functional Biology and Biotechnology of Plants. Portugal **Comunicação on-line**, 2020.

10. Campos, M. G., Anjos, O., Polen Apícola, Inovação e Normalização. Fórum Internacional De Abelhas Em Tempos De Pandemia, 29 e 30 agosto, Brasil, **Comunicação on-line**, 2020.

11. Gomes, A. N. P., Santos, F. A. R., Camara, C. A., Campos, M. G., Silva, T. M. S., *Chemical composition and free radical-scavenging activities of monofloral bee pollen from Mimosa pudica*. Iberphenol International Congress, 5 and 6 November, Coimbra, Portugal, **Comunicação on-line**, 2020.
12. Vitorino, C., *Surface-functionalized lipid nanoparticles for glioblastoma treatment*, Controlled Release Society, Annual Meeting and Exposition 2020, Virtual Meeting, Las Vegas, Nevada, USA, 28 junho – 1 julho. **Comunicação oral**.
13. Basso, J., Mendes, M., Silva, J., Cova, T., Pais, A., Vitorino, C., *How can machine learning and autonomy accelerate chemistry?*, Chemical Science Symposium 2020, RSC, 29-30 setembro, Londres, UK. **Comunicação em poster**.
14. Cova, T., Ferreira, C. F., Pais, A. A. C. C., *Predicting molecular similarity and toxicity using machine learning as a playground*, Chemical Science Symposium 2020 - *How can machine learning and autonomy accelerate chemistry?*, 2020. **Comunicação em poster**.
15. Vitorino, C., *Surface-functionalized lipid nanoparticles for glioblastoma treatment*, Curso avançado: Bionanossistemas para aplicações farmacêuticas e cosméticas, CF-UM-UP, Departamento de Física da Universidade do Minho, Braga 13 a 24 de julho de 2020. **Comunicação oral por convite**.
16. Adão, R., Cruz, P. F., Vaz, D. C., Fonseca, F., Pedersen, J. N., Ferreira-da-Silva, F., Brito, R. M. M., Ramos, C. H. I., Otzen, D., Keller, S., Bastos, M., *DIBMA nanodiscs keep α -synuclein folded*, 4th ARBRE-MOBIEU Plenary Meeting “Living Molecules: Towards Integrative Biophysics of the Cell”, 24 – 26 February 2020, Prague, Czech Republic. **Poster**.
17. Cardoso, R. M. S., Martins, P. A. T., Leote, R. J. B., Razi Naqvi, K., Vaz, W. L. C., Moreno, M. J., *Effect of dipole moment on amphiphile solubility and partition into liquid ordered and liquid disordered phases in lipid bilayers*, Biophysical Society 64th Annual Meeting, San Diego, California, USA, 2020, DOI:doi.org/10.1016/j.bpj.2019.11.597. **Poster**.
18. Geraldès, C. F. G. C., Pinho, S. L. C., Sereno, J., Abrunhosa, A. J., Delville, M. H., Rocha, J., Carlos, L. D. *Gd(III) and Eu(III) Loaded Iron Oxide@Silica Core-Shell Nanocomposites as Trimodal Contrast Agents for MRI and Optical Imaging*, ESMI-EMIM (European Molecular Imaging Meeting) 2020 virtual meeting, 24th - 28th August 2020. **Comunicação Oral**.
19. Moreno, M. J., *Can coffee help reduce cholesterol levels? Insights from in vitro studies*, IFNH Seminar Program - Spring2020, Zurich, Switzerland. **Lição convidada**.
20. Ratnakar, J., Chirayil, S., Funk, A. M., Zhang, S., Queiró, J. F., Geraldès, C. F. G. C., Kovacs, Z., Sherry, A. D., *An Yb³⁺ complex as a pH-responsive paraCEST agent for MRI*, ESMI-EMIM (European Molecular Imaging Meeting) 2020 virtual meeting, 24th - 28th August 2020. **Comunicação Oral**.
21. Tavares, N. C. T., Cova, T. F. G. G., Nunes, S. C. C., Murtinho, D., Serra, M. E. S., Pais, A. A. C. C., *Thiazolidine-Based Amino Alcohols with Opposite Stereochemistry: Catalytic and Computational Analysis of their Behaviour as Ligands in Enantioselective Alkylation Processes*, International School of Chemistry, Camerino, Italy, 2020. **Comunicação Oral**

22. Pinho e Melo, T. M. V. D., *A Química de Nitrosoalquenos e Azoalquenos na Síntese de Compostos Heterocíclicos*, Ciclo de Seminários PPG-CAPS UFF (Universidade Federal Fluminense), no âmbito do Projeto CAPES/PRINT – “Inovações envolvendo a proteína P53 para a Terapia do Câncer e outras Aplicações Biológicas”, via Canal do PPG-CAPS no YouTube, 2020.

Palestra

23. Lopes, S. M. M., *Síntese de Novos Esteroides Penta- e Hexacíclicos Quirais*, Ciclo de Seminários PPG-CAPS UFF (Universidade Federal Fluminense), no âmbito do Projeto CAPES/PRINT – “Inovações envolvendo a proteína P53 para a Terapia do Câncer e outras Aplicações Biológicas”, via Canal do PPG-CAPS no YouTube, 2020. **Palestra**

24. Caridade, P. J. S. B., *Copernicus: From Earth Observation Open Data to R&D and Daily Applications*, Big Data and Remote Sensing, Instituto Politécnico de Beja, Portugal, February 20, 2020. **Lição plenária.**

25. Rodrigues, S. P. J., *Tabela Periódica Humana: celebrando a humanidade da ciência*, SciCom2020 (congresso online) 7 de maio a 18 de junho de 2020. **Comunicação oral.**

26. Rodrigues, S. P. J., *Psychotropic molecules and literature: A renewed chemical vision*. 9th European Conference on Mental Health, Helsinki, Finland (online), 30 September - 2 October 2020. **Comunicação oral.**

27. Rodrigues, S. P. J., *Tratamentos com medicamentos ou terapias não-farmacológicas? O que sabemos e o que não sabemos (na visão de um químico)*. História Interdisciplinar da Loucura, Psiquiatria e Saúde Mental XI (online) 26 a 28 de outubro de 2020. **Comunicação oral.**

28. Rodrigues, S. P. J., *À procura da química nos livros*, II Ciclo de Webinários de Leitura, Centro de Estudos Superiores da Universidade de Coimbra, Alcobaca, 31 de outubro de 2020. **Lição plenária.**

29. Rodrigues, S. P. J., *Cientistas, activistas e comunicação: oportunidades, armadilhas e perigos*, IV Congresso Internacional Education, Environment and Development, 11-14 novembro de 2020. **Comunicação oral.**

30. Caridade, P. J. S. B., *Challenges on university technology transfer*, Indian-Portuguese Technology Summit, India, December 7-9, 2020. **Lição plenária.**

Lições Plenárias, Comunicações e Pósteres Apresentados em Reuniões Científicas Nacionais

1. Calvete, M. J. F., Piccirillo, G., Eusébio, M. E. S., Pereira, M. M., *Tetrapyrrole-based catalysts for oxidative transformations through sustainable processes*, 13th National SPQ Organic Chemistry Meeting/6th National SPQ Medicinal Chemistry Meeting, Aveiro, 2020. **Comunicação oral**

2. Pinto, S. M. A., Tomé, V. A., Gomes, D. M. P., Abrunhosa, A. J., Geraldês, C. F. G. C., Pereira, M. M., *Synthesis and structural modulation of tetrapyrrolic macrocycles: potential probes for PET and MRI imaging?*, 13th National SPQ Organic Chemistry Meeting/6th National SPQ Medicinal Chemistry Meeting, Aveiro, 2020. **Comunicação oral**

3. Aroso, R. T., Vinagreiro, C. S., Dabrowski, J. M., Schaberle, F., da Silva, G. J., Bagnato, V. S., Arnaut, L. G., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., *Structure-activity relationships of cationic imidazolyl photosensitizers for sub-micromolar inactivation of bacteria*, 13th National SPQ Organic Chemistry Meeting/6th National SPQ Medicinal Chemistry Meeting, Aveiro, 2020. **Poster**

4. Maldonado-Carmona, N., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., Ouk, T.-S., Villandier, N., Leroy-Lhez, S., *Acetylated lignin nanoparticles: a potential photosensitizer vehicle for antimicrobial photodynamic therapy*, 13th National SPQ Organic Chemistry Meeting/6th National SPQ Medicinal Chemistry Meeting, Aveiro, 2020. **Poster**

5. Pereira, M. M., Rodrigues, F. M. S., Dias, L. D., Damas, L., Gonzalez, A. S. C., Carrilho, R. M. B., *Catalytic sequential reactions in organic synthesis: novel strategies for multifunctionalization of olefins*, 13th National SPQ Organic Chemistry Meeting/6th National SPQ Medicinal Chemistry Meeting, Aveiro, 2020. **Poster**

6. Rodrigues, F. M. S., *From CATSUS PhD program to industry - a personal perspective*, 5th CATSUS Workshop, online from Coimbra, 2020. **Comunicação oral**

7. Pereira, M. M., Carrilho, R. M. B., Damas, L., *Materiais Plásticos – Ciência, Educação e Ambiente*, Jornadas Científicas e Culturais - Rumos da Ciência, Instituto Politécnico de Castelo Branco, Castelo Branco, 2020. **Comunicação oral convidada**

8. Pereira, M. M., Aroso, R. T., Vinagreiro, C., Paixão, F., *Bactérias Multirresistentes aos antibióticos – Ciência e Educação para a Saúde*, Jornadas Científicas e Culturais - Rumos da Ciência, Instituto Politécnico de Castelo Branco, Castelo Branco, 2020. **Comunicação oral convidada**

9. Librando, I., Mahmoud, A. G., Carabineiro, S. A. C., Guedes da Silva, M. F. C., Geraldês, C. F. G. C., Pombeiro, A. J. L., *Functionalized PTA derivatives as homo- and heterogeneous catalysts for the copper(I)-catalyzed azide-alkyne cycloaddition (CuAAC)*, 5th CATSUS Workshop, IST, Lisbon, Portugal, November 20th, 2020. **Comunicação Oral.**

10. Mata, A. I., Alves, N. G., Luís, J. P., Simões, C. J. V., Brito, R. M. M., *On The Use of Molecular Interaction Fields to Predict Drug-Resistance*. 13th National Organic Chemistry Meeting (13ENQO), 6th National Medicinal Chemistry Meeting (6ENQT), 15 – 17 January 2020, Aveiro, Portugal. **Comunicação Oral.**

11. Pinto, S. M. A., Tomé, V. A., Gomes, D. M. P., Abrunhosa, A. J., Geraldês, C. F. G. C., Pereira, M. M., *Synthesis and Structural Modulation of Tetrapyrrolic Macrocycles: Potential Probes for PET and MRI Imaging?* 13th National Organic Chemistry Meeting- 6th national Medicinal Chemistry Meeting, Aveiro, Portugal, 15-17 January, 2020. **Poster.**

12. Tavares, N. C. T., Murtinho, D., Serra, M. E. S., *Enantioselective alkynylation of aldehydes under mild and cheap conditions: ligand screening and optimization studies*, 13th National Organic Chemistry Meeting (13ENQO), 6th National Medicinal Chemistry Meeting (6ENQT), Aveiro, 2020. **Poster**.
13. Lopes, S. M. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Meso-substituted Corroles from Nitrosoalkenes and Dipyrrromethanes*, 13th National Organic Chemistry Meeting (13ENQO) and 6th National Medicinal Chemistry Meeting (6ENQT), Aveiro, 2020. **Poster**
14. Alves, A. J. S., Alves, N. G., Fontinha, D., Bártolo, I., Soares, M. I. L., Lopes, S. M. M., Prudêncio, M., Taveira, N., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Structural Insights into the distinct antimicrobial profile of spiro- β - and spiro- γ -lactam*, 13th National Organic Chemistry Meeting (13ENQO), 6th National Medicinal Chemistry Meeting (6ENQT), Aveiro, 2020. **Poster**.
15. Nascimento, B. F. O, Laranjo, M., Campos, M., Pereira, N. A. M, Brito, A. F., Brites, G., M. Pineiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Platinum(II) Ring-Fused Chlorin Photosensitizers for Cancer Theranostic Applications: Synthesis, in vitro Cell Biology and in vivo Proof of Concept*, 13th National Organic Chemistry Meeting (13ENQO), 6th National Medicinal Chemistry Meeting (6ENQT), Aveiro, 2020. **Comunicação Oral**
16. Brandão, P., Burke, A. J., Pineiro, M., *Synthesis of novel isatin-based druglike compounds via Multicomponent reactions*, CATSUS Workshop V, 2020. **Comunicação Oral**
17. Gomes, C., Lopes, S M. M., Pinho e Melo, T. M. D. V., Royo, B., Martins, L. M. D. R. S., Pineiro, M., *Green Approaches for the Synthesis of N-heterocyclic Ligands: Synthesis and Catalytic Evaluation of C-Scorpionate based Catalysts*, CATSUS Workshop V, 2020. **Comunicação Oral**
18. Gomes, C., Pineiro, M., *Modern Methods for the Synthesis of Metalloporphyrins*, 13th National Organic Chemistry Meeting (13ENQO), 6th National Medicinal Chemistry Meeting (6ENQT), Aveiro, 2020. **Poster**
19. Brandão, P., Laranjo, M., Botelho, M. F. Burke, A. J., Pineiro, M., *Engaging Isatins in Multicomponent Reactions – Ugi Adducts with Promising Biological Activity*, 13th National Organic Chemistry Meeting (13ENQO), 6th National Medicinal Chemistry Meeting (6ENQT), Aveiro, 2020. **Poster**
20. Alves, C. C., Grosso, C., Barrulas, P. C., Cardoso, A. L., Burke, A., Lemos, A., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Asymmetric Neber Approach to Chiral 2-(Tetrazol-5-yl)-2H-Azirines*, 13th National Organic Chemistry Meeting (13ENQO), 6th National Medicinal Chemistry Meeting (6ENQT), Aveiro, 2020. **Comunicação Oral**
21. Tavares, N. C. T., Nunes, S., Murtinho, D., Serra, M. E. S., Pais, A. A. C. C., *Bridging Together Organic and Computational Chemistry: Thiazolidine-Based Catalysts and Transition State Alkylation Structures as Definers of Enantioselectivity*, CATSUS Workshop V, 2020. **Comunicação Oral**.

22. Rénio, M., Murtinho, D., Ventura M. R., *Bifunctional 1,3-diamine organocatalysts derived from (+)-camphoric acid*, CATSUS Workshop V, 2020. **Comunicação Oral**

23. Pinho e Melo, T. M. V. D., *Heterocycles from Nitrosoalkenes, Azoalkenes and 1-Azadienes*, 13th National Organic Chemistry Meeting (13ENQO), 6th National Medicinal Chemistry Meeting (6ENQT), Aveiro, 2020. **Conferência Convidada**

24. Alves, N. G., Alves, A. J. S., Bártolo, I., Prudêncio, M., Taveira, N., Pinho e Melo, T. M. V. D., *A Novel Spiro- β -lactam with Potent Anti-HIV and Anti-plasmodial Activity*, 13th National Organic Chemistry Meeting (13ENQO), 6th National Medicinal Chemistry Meeting (6ENQT), Aveiro, 2020. **Poster**

PUBLICAÇÕES DE ATAS EM CONGRESSOS (Proceedings)

1. Cardoso, K., Guimarães, T., Silva, F. C., Pereira, N., Nascimento, B., Pineiro, M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Laranjo, M., Botelho, M. F., *Evaluation of Cell Proliferation in Breast Cancer Cell Lines by the MTT Assay*, *MEDICINE*, 99, pp 12-13, 2020. [Proceedings of the CIMAGO Meeting – Challenges in Oncobiology Coimbra, 31st january 2020].

2. Braz, J., Laranjo, M., Lopes, S., Pineiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Corroles as Photosensitizers for Photodynamic Therapy*, *MEDICINE*, 99, pp 11-12, 2020. [Proceedings of the CIMAGO Meeting – Challenges in Oncobiology Coimbra, 31st january 2020].

3. Ferreira, M. B., Laranjo, M., Marto, C. M., Amaro, I., Spagnuolo, G., Ferreira, M. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Botelho, M. F., Carrilho, E., Pereira, N., Paula, A., *Isolation and Identification of Cytotoxic Compounds Present in Biomaterial Life[®]*, *Proceedings*, 4, 2020. [Proceeding of the 1st International Electronic Conference on Applied Sciences [Session: Applied Dentistry]. DOI: 10.3390/ASEC2020-07641.

4. Mendes, M., Basso, J., Sousa, J., Pais, A., Vitorino, C., *Designing ultra-small nanostructured lipid carriers: critical process parameters*, The 1st International Electronic Conference on Pharmaceutics, dezembro 2020. DOI:10.3390/iecp2020-08691

5. Vitorino, C., Miranda, M., Veloso, C., Cardoso, C., *"From lab to upscale – Boosting formulation performance through in vitro technologies"*. The 1st International Electronic Conference on Pharmaceutics, dezembro 2020. DOI:10.3390/iecp2020-08674

ORGANIZAÇÃO DE CONFERÊNCIAS CIENTÍFICAS E SEMINÁRIOS Nacionais e Internacionais

1. Fausto, R., Membro da Comissão Científica Internacional, VIII International Conference on Perspectives in Vibrational Spectroscopy, Bangalore, India, 2020.

2. Fausto, R., Membro da Comissão Científica, V Encontro Científico NEQ/AAC, Coimbra, 2020.
3. Fausto, R., membro da Comissão Científica Internacional e Presidente da Comissão Organizadora, Virtual Meeting on “Molecular Structure – Techniques to resolve (MSTR-2020)”, United Scientific Group, San Francisco, USA, 2018.
4. Fausto, R., Membro da Comissão Científica Internacional e da Comissão Organizadora, Virtual Meeting “Analytical and Bioanalytical Methods Conference (Analyticon 2020)”, United Scientific Group, San Francisco, USA, 2020.
5. Nogueira, B. A., Coordenador Geral da 2ª edição da Escola Molecular, Escola Pré-Universitária de Química, Coimbra, Portugal, 2020.
6. Mendes, M. I. P., organizadora da *MedChemTrain e-School 2020*
7. Pereira, M. M., Organização da reunião inter-institucional: *DUALPI - Síntese de moléculas bimodais para inativação fotodinâmica de bactérias multiresistentes por terapia dual*, online, Coimbra e São Carlos (Brasil), 2020.
8. Pinto, S. M. A., Organização do seminário: *RMN de ¹⁹F – Teoria e Aplicações*, online, Coimbra, 2020.
9. Rodrigues, F. M. S., Organização do seminário: *Automated Flash Chromatography: Principles and Applications*, online, Coimbra, 2020.
10. Rodrigues, F. M. S., Organização do seminário: *Online scientific databases and resources*, online, Coimbra, 2020.
11. Aroso, R. T., Organização do seminário: *2D NMR techniques for structure determination*, online, Coimbra, 2020.
12. Pereira, M. M., Calvete, M. J. F., Pinto, S. M. A., Carrilho, R. M. B., Rodrigues, F. M. S., Aroso, R. T., Piccirilo, G., Gonzalez, A., Organização da reunião: *Combate à Covid-19 - Desenvolvimento do gel desinfetante UCareUClean*, online, Coimbra, 2020.
13. Marques, J. M. C., Organizador de “Palestras de Química Física Online”, 18 de novembro e 16 de dezembro de 2020.
14. Campos, M. G., Organization Member, Iberphenol International Congress 2020, 5 and 6 November, Coimbra Portugal. On-line (in Project - Cooperative research network in the field of polyphenols and their industrial applications. Reference: 0377_IBERPHENOL_6_E| INTERREG V A Espanha Portugal, Instituição Financiadora: POCTEP- International Cooperation Programme for Spain and Portugal, 2014-2020).
15. Pineiro, M., Membro da Comissão Organizadora do *Workshop CATSUS5*, Conferência online, 2020.

16. Pinho e Melo, T. M. V. D., Membro da Comissão Organizadora do *13º Encontro Nacional de Química Orgânica (13ENQO) e 6º Encontro Nacional de Química Terapêutica (6ENQT)*, Universidade de Aveiro, 2020.

TESES

Teses de Doutoramento

1. Alcides Pinto Simão, *Gas-Phase Conformational Characterization of Trace Amine Neurotransmitters - A Rotational Spectroscopy study*. Universidade de Coimbra, 2020.

URL: <http://hdl.handle.net/10316/91053>

[Orientação: Fausto, R.]

2. Carolina da Silva Vinagreiro, *Desenvolvimento de Entidades Químicas Inovadoras para Superar o Desafio da Resistência Antimicrobiana*, Tese de Doutoramento em Química Medicinal (Programa doutoral *ChemMedTrain*), Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Pereira, M. M., Prudêncio, M.]

3. Vanessa Almeida Tomé, *Cancer Probes for Cancer Molecular Imaging*, Tese de Doutoramento em Química Medicinal (Programa doutoral *ChemMedTrain*), Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Pereira, M. M., Góis, P.]

4. Daniela Ribeiro Pinheiro, *Synthesis, photophysical and electrochemical studies on tryptanthrin and indigo. Historic molecules with modern applications*, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Seixas de Melo, J. S., Pineiro, M.]

5. Alice Benzi, *The Chemistry of Nitrosoalkenes in the Synthesis of Novel 1,6-Dihydropyrrolo[3,2-c]carbazole and β -Carboline Derivatives with relevance in Medicinal Chemistry*, visiting PhD student of the University of Genoa, Italy.

[Supervisor: Giovanni PETRILLO]

In the framework of the Erasmus + program (16/09/2020 to 21/01/2021).

Orientação de Estudantes de Doutoramento Visitantes

Teses de Mestrado

1. Ulisses Fareleira Marques, *Estudo do espólio Arqueológico da Universidade de Coimbra por Espectroscopia de Raman e Espectroscopia de Fluorescência de Raios-X*, Mestrado em Química Forense, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Fausto, R., Gil, F. P. S. C.]

2. João Afonso Sêco Vieira Santos, *Nanocristais farmacêuticos. Síntese, caracterização e otimização de processos*, Mestrado em Química, Departamento de Química, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Eusébio, M. E. S.; Castro, R. A. E.]

3. Diogo Oliveira da Costa, *Desenvolvimento e Validação de um Método de GC-MS para Identificação e Quantificação de LSD em Amostras Apreendidas*, Mestrado em Química Forense, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Matias, A. I.; Eusébio, M. E. S.]

4. Francesca Peluso, *New Solid Forms of Pitavastatin Calcium: Design, Synthesis and Characterization*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade de Modena, 2020.

[Orientação: Castro, Ricardo A. E.; Gamberini, M. C.]

5. Bárbara Margarida Maia Lima. *Avaliação de novos fotossensibilizadores para o tratamento de tumores agressivos com terapia fotodinâmica*. Mestrado em Química Medicinal, dezembro 2020.

[Orientação: Gomes-da-Silva, L.]

6. Amílcar D. Prata, “Fotoquímica de tetrazolonas: Um estudo teórico”, MSc Chemistry thesis, University of Coimbra, 2020.

[Orientação: Serpa, C.; co-orientação: Caridade, P. J.]

7. Diogo A. C. F. Pereira, “Permeabilização de membranas por ultrassons de alta frequência”. MSc thesis, University of Coimbra, September 2020.

[Orientação: Arnaut, L. G.]

8. Andreia Cristina da Silva Gonzalez, *Desenvolvimento de Catalisadores para Conversão de CO₂ em produtos de valor acrescentado*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Pereira, M. M., Carrilho, R. M. B.]

9. Tiago Ferreira Machado, *Síntese de Estruturas Orgânicas Covalentes (COFs) para Adsorção de Poluentes e Fármacos em Meio Aquoso*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Valente, A. J. M., Murtinho, D.]

10. Gonçalo Fernandes de Abreu, *Efeito de Corantes nas Propriedades de Micelização de Surfactantes Iónicos*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Valente, A. J. M.]

11. Sandra Isabel Matias Mendes, *Remoção do Ião Manganês na Água Bruta a pH Elevado*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Valente, A. J. M., Figueiredo, C. I. C.]

12. Diana da Costa Dias, *Interação de ciclodextrinas com péptidos contendo aminoácidos aromáticos a partir de estudos de difusão e de espectroscopia de ressonância magnética nuclear e de fluorescência*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Ribeiro, A. C. F., Ramos, M. L. D.]

https://estudogeral.sib.uc.pt/bitstream/10316/92514/1/DianaDias_Tese_v1.pdf

13. Carla Sofia Duarte Cunha, *Complexos binucleares de cumarinas-AU(I): Síntese, Fotofísica e Estudos Computacionais*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Seixas de Melo, J. S.]

14. Pedro Ribeiro Lourenço de Matos Neves, *Desenvolvimento e validação de métodos analíticos para a determinação de microcistinas e herbicidas em matrizes aquosas*, Mestrado em Química, vertente Controlo da Qualidade e Ambiente, CESAB - Centro de Serviços do Ambiente (Mealhada), 2020.

[Orientação: Pereira, J. C.]

15. Daniel José Ferreira Santos, *Controlo da qualidade ao nível de uma indústria farmacêutica*, Mestrado em Química, vertente Controlo da Qualidade e Ambiente, FARMALABOR (Grupo Medinfar, Condeixa), 2020.

[Orientação: Pereira, J. C.]

16. Isa Mafalda Cardoso Vieira, *Paediatric Drug development and formulation design – a Regulatory perspective*, Monografia de Mestrado, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2020

[Orientação: Vitorino, C.]

17. João Pedro Ferraz Costa, *Bioimpressão 4D: Aplicações e perspetivas futuras*, Monografia de Mestrado, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2020

[Orientação: Vitorino, C.]

18. Ana Sofia Almeida Silva Morais, *Organ-on-a-chip: current status and future prospects*, Monografia de Mestrado, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2020

[Orientação: Vitorino, C.]

19. Alexandro Pereira Azevedo, *Thenanostic Nanosystems combining gene therapy and imaging agents for cancer treatment*, Mestrado em Bioquímica, Universidade de Coimbra, 2020.

[co-Orientação: Geraldes, C. F. G. C.]

20. Ana Carolina Lucas Branco, *Estudo da viabilidade e incorporação de Myrtus spp. em produtos alimentares*, Mestrado em Gestão da Qualidade e Segurança Alimentar, Instituto Politécnico de Leiria, 2020.

[Orientação: Vaz, D. C., Campos, M. J.]

21. Andreia Sofia Henriques Serineu, *Implementação do referencial IFS Food – versão 6.1 numa indústria alimentar*, Mestrado em Segurança Alimentar, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Loura, L. M. S.]

22. Carlos Daniel Figueira Coelho, *Caracterização da Fotofísica e Comportamento Ácido-Base de Derivados da fluoresceína e Rodamina*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Moreno, M. J., co-orientação: Loura, L. M. S.]

23. Patrícia Pereira Pescadinha, *Fatty Acid profile of Zooplankton species of the Antarctic Southern Ocean*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Moreno, M. J.]

24. Sofia Batista Martins Soares, *Caracterização das sementes do cardo para sua valorização*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Moreno, M. J.]

25. Taciana Raquel Bertotti, *Corema Album (L.) D. Don: Caracterização físico-química*, Mestrado em Gestão da Qualidade e Segurança Alimentar, Politécnico de Leiria, 2020.

[Orientação: Vaz, D. C., Campos, M. J.]

26. Tiago Ferreira Machado, *Síntese de Estruturas Orgânicas Covalentes (Cofs) para Adsorção de Poluentes e Fármacos em Meio Aquoso*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2020. [Orientação: Valente, A., Murtinho, D.]

27. Andreia Daniela dos Santos Vieira, *Síntese de Tensioativos Resultantes da Valorização dos Óleos Alimentares*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Murtinho, D., Henriques, C. A.]

28. Rafaela Rodrigues Teixeira, *Valorização de Gorduras Animais: uma Abordagem com Foco na Economia Circular*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Henriques, C. A., Murtinho, D.]

29. João Pedro Gomes de Oliveira Braz, *Trans-A₂B-Corroles are Superior Photosensitizers for Lung Cancer*, Mestrado em Investigação Biomédica, Faculdade de Medicina, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Botelho, F., Lopes, S. M. M.]

Outras Teses (Estágio de Licenciatura)

1. Gonçalo Fernando Loureiro, *Investigação de formas sólidas de atorvastatina cálcio*, Licenciatura em Química, 2020.

[Orientação: Maria, T. M. R.]

2. Ana Teresa Afonso Domingues, *Terapêuticas biológicas para a doença de Crohn e papel de farmacêutico*, Mestrado integrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Canotilho, J.]

3. Ana Luísa Santiago de Almeida e Silva, *Ethosomes as nanocarriers for the development of skin delivery formulations*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Castro, R. A. E.]

4. Carlos Alberto de Sousa Ferreira, *Prevenção e Tratamento da Meningite, em Portugal*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Castro, R. A. E.]

5. Raquel Rebelo Paulino, *Cromatografia Líquida, Avanços e Inovações*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade de Coimbra, 2020.
[Orientação: Castro, R. A. E.]
6. Rute Marlene Silva Gomes, *Implicações da obesidade na saúde canina e estratégias terapêuticas*, Mestrado integrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade de Coimbra, 2020.
[Orientação: Canotilho, J.]
7. Inês Amado Duarte, *Osteoartrite canina: opções de tratamento*, Mestrado integrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade de Coimbra, 2020.
[Orientação: Canotilho, J.]
8. Bruna Coutinho “Permeações cutâneas de formulações contendo minoxidil”, *Medicinal Chemistry BSc project report*, July 2020.
[Orientador: Serpa, C.; co-orientador: Cardoso, R.]
9. Diana Costa “Permeações cutâneas de formulações contendo Calceína”, *Medicinal Chemistry BSc project report*, July 2020.
[Orientador: Serpa, C.; co-orientador: Cardoso, R.]
10. Anita S. Amorin, “Alterações na expressão da PD-L1 induzidas pela Terapia fotodinâmica com redaporfin”, *Medicinal Chemistry BSc project report*, July 2020.
[Orientador: Arnaut, L. G.]
11. Diana Lourenço Marques, *Síntese do catalisador Lignina-ZnTDCPP para a degradação de antibióticos*, Licenciatura em Química, 2020.
[Orientação: Pereira, M. M., Calvete, M. J. F.]
12. Vitaliy Masliy, *Processos Catalíticos para Transformação de Produtos Naturais em potenciais Fragrâncias*, Licenciatura em Química, 2020.
[Orientação: Pereira, M. M., Carrilho, R. M. B.]
13. Catarina Matias Rodrigues, *Coeficientes de difusão mútua ternários em soluções aquosas de cloreto de sódio e lactose*, Licenciatura em Química, 2020
[Orientação: Ribeiro, A. C. F.]
14. Maria Carolina da Costa Janeiro, *Aplicações de BODIPYs*, Licenciatura em Química Medicinal, Licenciatura em Química, 2020
[Orientação Sobral, A. J. N.]
15. Lobete da Silva, *Aplicações Terapêuticas (PDT) e de Diagnóstico (Fluorescência) envolvendo BODIPYs em Linhas Celulares do Cancro do Pulmão*, Licenciatura em Bioquímica, 2020
[Orientação Sobral, A. J. N.]
16. João Carlos Maçãs da Silva Pereira, *Transições de fase em agregados coloidais usando técnicas de Monte Carlo*, Licenciatura em Química, 2020.
[Orientação: Marques, J. M. C., co-orientação: Prudente, F. V.]

17. Marla Filipa Oliveira Pinto, *Computational design and characterization of DNA-origami-based structures as carriers of anticancer drugs*, Licenciatura em Química Medicinal, 2020.
[Orientação: Nunes, S. C. C., Pais, A. A. C. C.]
18. Ana Carolina Ramos Quinteiro, *Computational modeling of drug recognition and free-energy patterns in supramolecular nanostructures based on host-guest interactions-chemistry*, Licenciatura em Química, 2020.
[Orientação: Cova, T. F., Nunes, S. C. C., Pais, A. A. C. C.]
19. Francisca Dias Pereira, *Computational design of DNA hydrogels to removing micropollutants from water environments*, Licenciatura em Química, 2020.
[Orientação: Cova, T.F., Nunes, S.C.C., Pais, A.A.C.C.]
20. Beatriz Simões, *In silico design of hybrid nanoparticles for transdermal applications: from cosmetics to advanced melanoma*, Licenciatura em Química Medicinal, 2020.
[Orientação: Cova, T. F., Nunes, S. C. C., Pais, A. A. C. C.]
21. Diogo Martins Barradas, *Protocolos de agregação do peptídeo β -amilóide 1-42 (A β 42) para adaptar num sistema de rastreio de alto rendimento de potenciais compostos inibidores de fibras amilóides de A β 42*. Estágio de licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2020.
[Orientação: Brito, R. M. M., Co-orientação: Almeida Z. L., Cruz. P. F.]
22. José Tiago de Almeida Faustino, *Agentes de Contraste para MRI*. Estágio de licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2020.
[Orientação: Castro, M. M.]
23. Mariana Martins Ferreira, *Doença celíaca e glúten: Revisão bibliográfica e análise estrutural preliminar*. Estágio MEE, Licenciatura em Medicina, Universidade do Algarve, 2020.
[Orientação: Vaz, D. C., Neves-Petersen, M. T.]
24. Tânia Patrícia Almeida Sousa, *O potencial papel da interação da proteína transtirretina com o peptídeo β -amilóide na modulação da doença de Alzheimer*. Estágio de licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2020.
[Orientação: Brito, R. M. M., Co-orientação: Almeida Z. L., Cruz. P. F.]
25. Pedro Miguel Cruz Matias, *Síntese de "Covalent Organic Frameworks" (COFs) para Reações de Catálise*, Licenciatura em Química, 2020.
[Orientação: Murtinho, D.]
26. Madalena Silva, *Síntese e Estudos de Atividade Antimicrobiana de Compostos de Base Tiazolidina*, Licenciatura em Química Medicinal, 2020.
[Orientação: Murtinho, D.; Serra, M. E. S.]
27. Carolina Maria Neves de Matos, *Síntese de Novas Hidrazonas Derivadas de Tiazolidinas com Potencial Biológico e Catalítico*, Licenciatura em Química, 2020.
[Orientação: Serra, M. E. S.]

28. Luis Manuel Joaquim Maria, *Estudos de Otimização de Reações de Adição de Michael Enantiosseletivas*, Licenciatura em Química, 2020.

[Orientação: Serra, M. E. S.]

29. Daniela Sofia de Sousa Teixeira, *Synthesis of New p53 Activators with Drug-like Profile*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V.D., Soares, M. I. L.]

30. Carolina Mendes Amaral, *Synthesis of New p53 Activators with MedChem Profile*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2020.

[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V.D., Soares, M. I. L.]

31. Eduarda Santos Ventura, *Síntese de derivados da Isatina – aplicação da reação de Ugi na preparação de novos compostos com atividade biológica*, Licenciatura em Química Medicinal, 2020.

[Orientação: Pineiro, M.]

PROTÓTIPOS LABORATORIAIS

SOFTWARE

1. Rocha, C. M. R., Varandas, A. J. C., A general code for fitting global potential energy surfaces via CHIPR method: Triatomic molecules, 2020.

<https://data.mendeley.com/datasets/8wdv87gt5x/1>

DOI: 10.17632/8wdv87gt5x.1

2. Rocha, C. M. R., Varandas, A. J. C., A general code for fitting global potential energy surfaces via CHIPR method: Direct-Fit Diatomic and tetratomic molecules, 2020.

<https://data.mendeley.com/datasets/8wdv87gt5x/2>

DOI: 10.17632/8wdv87gt5x.2

PATENTES

1. *Atropisomers of halogenated tetraphenyl bacteriochlorins and chlorins and their use in photodynamic therapy*, N. P. F. Gonçalves, T. P. C. M. Santos, G. P. N. Costa, C. J. P. Monteiro, F. A. Schaberle, S. C. Alfar, A. C. R. Abreu, M. M. Pereira, L. G. Arnaut Moreira, Luzitin S. A. e Universidade de Coimbra.

Patente nº 2017/06642. Data de concessão no Japão: 10/10/2020.

2. *Processo para a preparação de um derivado de clorina ou bacterioclorina*, L. G. Arnaut Moreira, M. M. Pereira, S. J. Formosinho, S. Simões, G. Stochel, K. Urbanska. Universidade de Coimbra.

Patente nº 0919868-7. Data de concessão no Brasil: 27/10/2020

3. *Atropisomers of halogenated tetraphenyl bacteriochlorins and chlorins and their use in photodynamic therapy*, N. P. F. Gonçalves, T. P. C. M. Santos, G. P. N. Costa, C. J. P. Monteiro, F. A. Schaberle, S. C. Alfar, A. C. R. Abreu, M. M. Pereira, L. G. Arnaut Moreira, Luzitin S. A. e Universidade de Coimbra.

Patente nº 2016238484. Data de concessão na Austrália: 02/07/2020

4. *Atropisomers of halogenated tetraphenyl bacteriochlorins and chlorins and their use in photodynamic therapy*, N. P. F. Gonçalves, T. P. C. M. Santos, G. P. N. Costa, C. J. P. Monteiro, F. A. Schaberle, S. C. Alfar, A. C. R. Abreu, M. M. Pereira, L. G. Arnaut Moreira. Luzitin S. A. e Universidade de Coimbra.

Patente nº 2712266. Data de concessão na Rússia: 18/01/2020.

5. *Low molecular weight derivatives of carboxamide halogenated porphyrins, namely chlorins and bacteriochlorins, and their applications in photodynamic therapy*, G. P. N. Costa, N. P. F. Gonçalves, C. J. P. Monteiro, A. C. R. Abreu, H. T. Soares, L. B. Rocha, F. A. Schaberle, M. M. Pereira, L. G. Arnaut Moreira. Luzitin SA and University of Coimbra.

Patente nº 2016259188. Data de concessão na Austrália: 13/02/2020

6. *Small cationic ortho-5,15-di-heteroaryl-chlorin and bacteriochlorin derivatives and their applications in photoinactivation of microorganisms*, L. G. Arnaut Moreira, M. M. Pereira, Z. L. Arnaut Moreira, S. M. A. Pinto, R. T. P. M. Aroso, A. C. S. Lobo

University of Coimbra and LaserLeap Technologies SA. PT patent application no. 20201000059003. 15/12/2020.

7. *Complexos Poliméricos de Lantanídeos Luminescentes e Matrizes de Fibras Celulósicas Funcionalizadas para Detecção de Contrafação*, PT patent application no. 20201000011960.

Inventores: A. J. M. Valente, A. A. C. C. Pais, D. M. B. Murtinho, A. F. Y. Matsushita, M. P. R. T. Faro.

Requerente: RAIZ e University of Coimbra. Pedido de patente nº 20201000011960, em Portugal.

8. *Water-soluble tryptanthrin derivatives for redox flow batteries*. Provisional patente application to Instituto Nacional de Propriedade Industrial (INPI) em 11/09/2020, em Portugal.

Inventores: D. R. Pinheiro, M. P. Gómez, J. S. Seixas de Melo.

Requerente: University of Coimbra.

9. *Dual nanostructured lipid carrier as a multifunctional platform for brain tumor therapy*. PT patent application no. 20191000061501, 2020, PCT/IB2020/061452.

Inventores: C. Vitorino, A. Pais, J. Sousa, A. F. Falcão, A. Fortuna, T. Cova, S. Nunes, J. Torres, M. Mendes, A. Almeida, L. Gonçalves.

Requerente: Univ. Coimbra and Faculty of Pharmacy of Univ. Lisbon.

10. *Complexos poliméricos de lantanídeos luminescentes e matrizes de fibras celulósicas funcionalizadas para detecção de contrafação* Pedido provisório Patente Portuguesa 20201000011960. Inventores: Valente, A. J. M., Pais, A. A. C. C., Murtinho, D. M. B., Matsushita, A. F. Y., Faro, M. P. R. T.,

Requerentes: Raiz e Universidade de Coimbra.

11. *Bis-furan derivatives as transthyretin (TTR) stabilizers and amyloid inhibitors for the treatment of familial amyloid polyneuropathy (FAP)*.

Inventores: Simões, C. J. V., Almeida, Z. C. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., Brito, R. M. P. M. F., Costa, D. C. S., Lopes, A. L. C.,

Patente Europeia nº 3.307.723.B1. Data de concessão na Europa: 11/11/2020

Requerente: BSIM Therapeutics, S. A. Coimbra (PT)

12. *Novel Spiro-Lactam Compounds, Process and Uses Thereof*. Inventores: Pinho e Melo, T. M. V. D., Santos, B. C. S., Pignatelli, R. M. P., Bártolo, I., Taveira, N. E. M. S. C.

Patente Europeia nº 3625238 A1. Data de concessão na Europa: 25/03/2020

Requerentes: Universidade de Coimbra, Faculdade de Farmácia da Universidade de Lisboa, Egas Moniz Cooperativa de Ensino Superior CRL, Instituto de Medicina Molecular

PROJECTOS

1. Fausto, R., Investigador Principal, Nunes, C. M. N. (Co-Investigador Principal), *Quantum Mechanical Tunneling in Organic Chemistry: New Reactivity Paradigms and Avenues for Molecular Design*, PTDC/QUI-QFI/1880/2020. *Classified first in the ranking by the Chemistry Panel*.

2. Nogueira, B. A., Investigador, *NABIA - New Approach to Bioremediation using Algae* – PTDC/BTA-GES/2740/2020.

PRÉMIOS ATRIBUIDOS EM 2020

1. João Carlos Simões, *A New Generation of Ring-fused Fluorinated Chlorins as Promising PDT Agents*, Setembro de 2018, Mestrado em Química Medicinal [Orientação: Teresa M. V. D. Pinho e Melo; Co-orientação: Nelson Pereira] - **Prémio Para Melhor Tese de Mestrado em Química Orgânica 2019 [Portuguese Award for Best Master Thesis in Organic Chemistry 2019]** - Prémio atribuído pela Divisão de Química Orgânica da Sociedade Portuguesa de Química (SPQ).

2. Alves, N. G., Alves, A. J. S., Bártolo, I., Prudêncio, M., Taveira, N., Pinho e Melo, T. M. V. D., *A Novel Spiro- β -lactam with Potent Anti-HIV and Anti-plasmodial Activity*, 13th National Organic Chemistry Meeting (13ENQO), 6th National Medicinal Chemistry Meeting (6ENQT), Aveiro, 2020 - **Prémio de Melhor Poster** (Melhor Comunicação em Painel de Química Terapêutica).

3. Brandão, P., Laranjo, M., Botelho, M. F. Burke, A. J., Pineiro, M., *Engaging Isatins in Multicomponent Reactions – Ugi Adducts with Promising Biological Activity*, 13th National Organic Chemistry Meeting (13ENQO), 6th National Medicinal Chemistry Meeting (6ENQT), Aveiro, 2020 - **Prémio de Melhor Poster** (Melhor Comunicação em Painel de Química Orgânica).