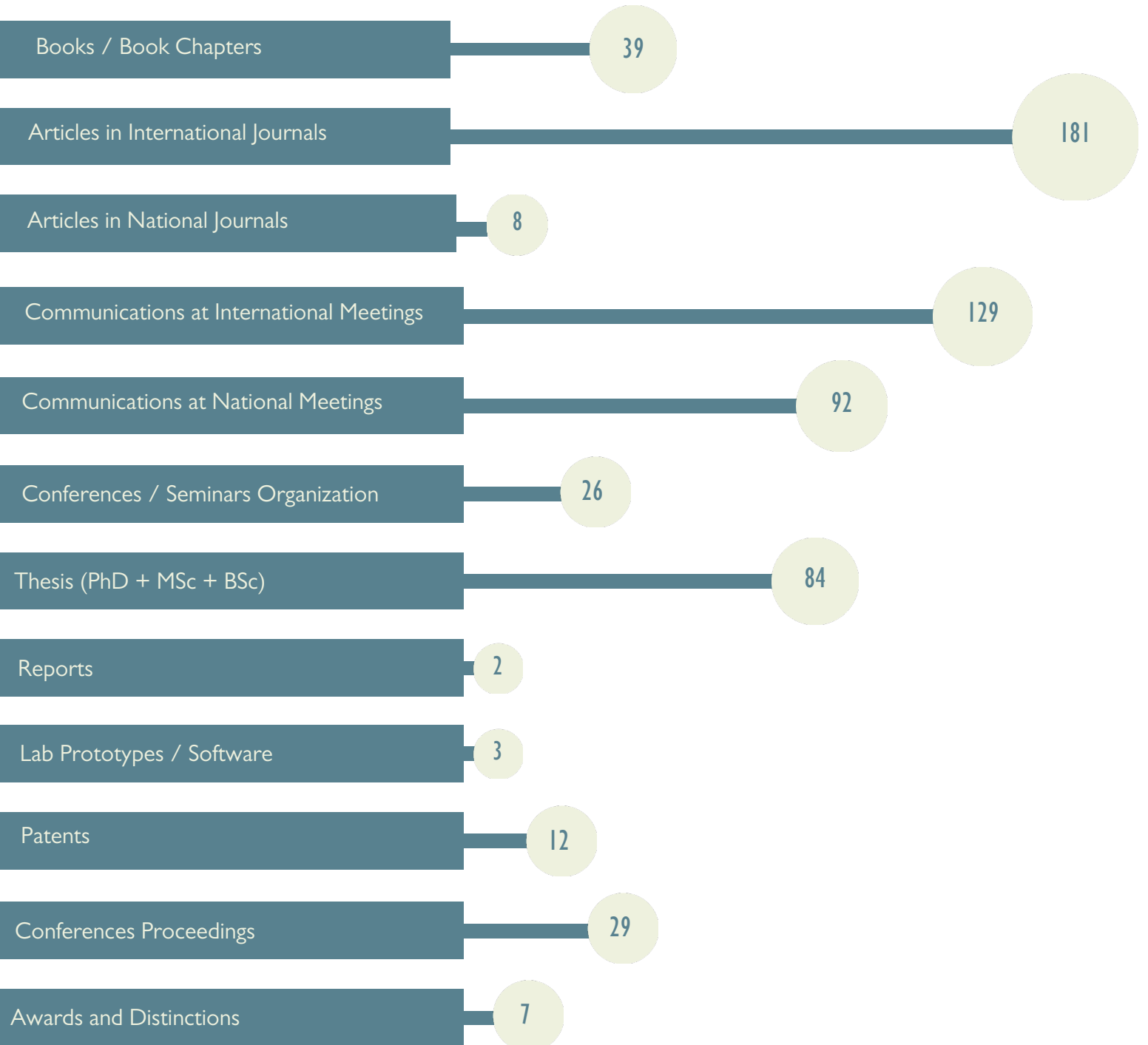


Overall Output Indicators

2022

# Overall Output Indicators

2022



# Contents

Books and Book Chapters.....	3
Articles in International Peer-Reviewed Journals.....	7
Articles in National Peer-Reviewed Journals.....	21
Communications at International Meetings.....	22
Communications at National Meetings.....	32
Conferences and Seminars Organization.....	39
Thesis.....	41
Technical Reports.....	48
Lab Prototypes / Software.....	48
Patents.....	48
Conferences Proceedings.....	50
Awards and Distinctions .....	53

## Books and Book Chapters

1. Fausto, R., Nikitin, T., Brás, E.M., *Light Induced Reactions in Cryogenic Matrices. Highlights 2019-2020*, em “*Specialistic Reports in Photochemistry*”, (Ed. S. Crespi e S. Protti), Royal Society of Chemistry (Londres, Reino Unido), 2022, Volume 49, Cap. 3, pp. 53-108.  
ISBN (Impresso) 978-1-83916-388-3; eISBN (pdf): 978-1-83916-526-9.
2. Roque, J. P. L., Nunes, C. M., Fausto, R., *Matrix Isolation in Heterocyclic Chemistry*, in “*Heterocycles- Synthesis, Catalysis, Sustainability and Characterization*”, T. M. V. D. Pinho e Melo e M. Piñeiro, eds., Wiley-VCG GmbH, Weinheim (Alemanha), 2022, Cap. 12, pp. 401-451, 2022.  
ISBN: 9783527348862.
3. Ildiz, G. O., Fausto, R., *Intramolecular Hydrogen Bonding: Shaping Conformers’ Structure and Stability*, em “*Spectroscopy and Computation of Hydrogen-Bonded Systems*”, M. J. Wojcik e Y. Ozaki, Eds., Wiley-VCG GmbH, Weinheim (Alemanha), 2022, Cap. 8, pp. 213-229, 2022.  
ISBN: 978-3-527-34972-2.
4. C. S. Lobo, L. C. Gomes-da-Silva, L. G. Arnaut, *Potentiation of Systemic Anti-Tumor Immunity with Photodynamic Therapy using Porphyrin Derivatives*, in *Handbook of Porphyrin Sciences*, K. M. Kadish, K. M. Smith, R. Guilard, Eds., World Scientific, Singapore, Cap. 222, pp 279-344 (2022).  
DOI: [10.1142/9789811246760\\_0222](https://doi.org/10.1142/9789811246760_0222).
5. Pereira, M. M., Carrilho, R. M. B., Calvete, M. J. F., *Tervalent Phosphorus Acid Derivatives*, in *Organophosphorus Chemistry: Volume 51 - Specialist Periodical Reports Series*, Allen, D. W., Loakes D., Tebby, J. C. Eds., Royal Society of Chemistry Books, Cambridge, pp 62-101, 2022.  
DOI: [10.1039/9781839166198-00062](https://doi.org/10.1039/9781839166198-00062)  
ISBN: 978-1-83916-522-1
6. Pereira, M. M., Calvete, M. J. F., Rodrigues, F. M. S., Carrilho, R. M. B., Dias, L. D., *Green Approaches to Catalytic Processes under Alternative Reaction Media*, in *Advanced Materials for a Sustainable Environment: Development Strategies and Applications*, Kumar, N., Makgwane, P. R. Eds., CRC Press, Taylor & Francis, Boca Raton, Florida (USA), pp 25-56, 2022.  
ISBN: 9781003206385
7. Pinho e Melo, T. M. V. D., Pineiro, M., Eds., *Heterocycles: Synthesis, Catalysis, Sustainability, and Characterization*, Wiley VCH GmbH, 2022.  
ISBN: 978-3-527-34886-2  
DOI: [10.1002/9783527832002](https://doi.org/10.1002/9783527832002)
8. Murtinho, D., Serra, M. E. S., *Transition Metal Catalysis in Synthetic Heterocyclic Chemistry*, in *Heterocycles: Synthesis, Catalysis, Sustainability, and Characterization*, Pinho e Melo, T. M. V. D., Pineiro, M., Eds., Wiley VCH GmbH, 2022, Cap. 5, pp 117-157.  
ISBN: 978-3-527-34886-2  
DOI: [10.1002/9783527832002.ch5](https://doi.org/10.1002/9783527832002.ch5)
9. Carreiro, E. P., Burke, A. I., *Amino acids as Chiral Building Blocks in Asymmetric Synthesis in Chiral Building Blocks in Asymmetric Synthesis: Synthesis and Application*, Wojaczyńska, E., Wojaczyński, Eds., Wiley-VCH (Germany), Cap. 6, pp 161-196.  
ISBN 9783527349463, Online ISBN:9783527834204 DOI:[10.1002/9783527834204](https://doi.org/10.1002/9783527834204)
10. Brandão, P., Pineiro, M., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Flow Chemistry: Sequential Flow Processes for the Synthesis of Heterocycles*, in *Heterocycles: Synthesis, Catalysis, Sustainability, and Characterization*, Pineiro, M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Eds., Wiley-VCH GmbH, Weinheim, (Germany), Cap. 11, pp 371-399.  
ISBN: 978-3-527-34886-2
11. Cardoso, A. L., Lopes, S. M. M., Sase, T. J., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Furans and Hydroxymethylfurans: Sustainable Sources of Molecular Diversity*, in *Targets in Heterocyclic Systems – Chemistry and Properties (THS)*, Attanasi, O. A., Gabrielle, B., Spinelli, D., Eds., Italian Chemical Society, Vol. 26, pp 456-508, 2022.

12. H., Abraham, A. R., Haghi, (Editors), *Sustainable Water Engineering: Smart and Emerging Technologies.*, Ed.by CRC press USA, Taylor & Francis Group, 2022.  
ISBN: 9781774915714.
13. Asli, H. H., A., Tatrishvili, T., Abraham, A. R., Haghi, A. K., Editors, *Sustainable Water Treatment and Ecosystem Protection Strategies*, Ed.by CRC press USA, Taylor & Francis Group, 2022.  
ISBN: 9781774915189.
14. Yaser, A. Z., Chin, S-X., Torre, L. S., Haghi, A. K. (Editors), *Waste Biorefineries: Future Energy, Green Products, and Waste Treatment*, Ed.by CRC press USA, Taylor & Francis Group, 2022.  
ISBN: 9781774915462
15. Mukbaniani, O. Tatrishvili, T., Rawat, N.K., Haghi, A. K. (Editors), *Biocomposites: Environmental and Biomedical Applications*, Ed.by CRC press USA, Taylor & Francis Group, 2022.  
ISBN: 9781774913697
16. Shukla, A., Asli, K. H., Rawat, N. K., Abraham, A. R., Haghi, A. K. (Editors), *Technological Advancement in Clean Energy Production: Constraints and Solutions for Energy and Electricity Development*, Ed.by CRC press USA, Taylor & Francis Group, 2022.  
ISBN: 9781774915585
17. Balkose, D, Ribeiro, A.C.F., Kalarikkal, N., Abraham, A. R., Haghi, A. K. (Editors), *Physics and Mechanics of New Materials: Synthesis, Processing, and Emerging Applications*, Ed.by CRC press USA, Taylor & Francis Group, 2022.  
ISBN: 9781774915738
18. Abraham, A. R., Torre, L. S., Tatrishvili, T., Haghi, A. K. (Editors), *Application of Engineering Principles and Practices in Biotechnology*, Taylor & Francis Group, 2022.  
ISBN: 9781774915608
19. Kodolov, V.I., Mukbaniani, O., Abraham, A. R., Haghi, A. K. (Editors), *Nanostructured Carbon for Energy Generation, Storage, and Conversion*, Ed.by CRC press USA, Taylor & Francis Group, 2022.  
ISBN: 9781774911488
20. Susanto, H., Leu, L. Y., Bakry, S. H., Haghi, A. K. (Editors), *Digital Education Security, Readiness, and Technology Enhancement*, Ed.by CRC press USA, Taylor & Francis Group, 2022.  
ISBN: 9781774915202
21. Asli, H.H., Pourhashemi, A., Abraham, A. R., Haghi, H. K., (Editors), *New Advances in Materials Technologies Experimental Characterizations, Theoretical Modelling, and Field Practices*, Ed.by CRC press USA, Taylor & Francis Group, 2022.  
ISBN: 9781774914847
22. Torre, L. S., Contreras-Esquivel, J. C., Abraham, A. R., Haghi, H. K., (Editors), *Bioresources and Bioprocess in Biotechnology for a Sustainable Future*, Ed.by CRC press USA, Taylor & Francis Group, 2022.  
ISBN: 9781774914328
23. Chia, C. H., Tatrishvili, T., Abraham, A. R., Haghi, H. K., (Editors), *Mechanics and Physics of Porous Materials, Novel Processing Technologies and Emerging Applications*, Ed.by CRC press USA, Taylor & Francis Group, 2022.  
ISBN: 9781774914656
24. Santos, C. I. A. V., Mialdun, A., Barros, M.C.F., Shevtsova, V., Ribeiro, A. C. F., *Coherent Analysis of Fickian Diffusion in Mixtures of Cyclohexane, Toluene and Methanol, in Physics and Mechanics of New Materials Synthesis, Processing, and Emerging Applications*, Balkose D., Ribeiro, A. C. F., Kalarikkal N. Abraham A. R. Haghi, A.K. (Editors), Apple Academic Press (USA), Chapter. 10 (in production), 2022.  
ISBN: 9781774915738

25. Sobral, M. C. M., Martins, I. M., Sobral, A. J. F. N., *Role of Chitosan and Chitosan-based nanoparticles against heavy metal stress in plants*, Chapter 13, 273-296, Kumar, S., Madihally, S. V. (Editors), Academic Press, Elsevier, 2022.  
ISBN: 978-0-323-85391-0
26. Rodrigues, A. C. B., Seixas de Melo, J. S., *Aggregation-induced emission: From small molecules to polymers—historical background, mechanisms and Photophysics Aggregation-Induced Emission*, in Topics in Current Chemistry Collections book series, 209-246, 2022.  
DOI: 10.1007/978-3-030-89933-2\_7
27. Zarzycki, P.K., Piaskowski, K., Lewandowska, L., Fenert, B., Świdarska-Dąbrowska, R.K., Ślącza-Wilk, M.M., Pereira, J. L. G. F. S. C., *Portable microplanar extraction, separation, and quantification devices for bioanalytical and environmental engineering applications*, Thomas, S., Ahmadi, M., Nguyen, T. A., Afkhami, A., Madrakian, T. (Eds.) *In Micro and Nano Technologies* (col.), Micro- and Nanotechnology Enabled Applications for Portable Miniaturized Analytical Systems, Elsevier, 163-196, 2022.  
DOI: 10.1016/b978-0-12-823727-4.00013-4
28. Cova, T., Vitorino, C., Ferreira, M., Nunes, S., Rondon-Villarreal, P., Pais, A. *Artificial Intelligence and Quantum Computing as the Next Pharma Disruptors*, in *Artificial Intelligence in Drug Design. Methods in Molecular Biology*, Heifetz, A. (eds) vol 2390, Humana, New York, NY (2022)  
DOI: 10.1007/978-1-0716-1787-8\_14  
ISBN: 978-1-0716-1787-8  
[https://doi.org/10.1007/978-1-0716-1787-8\\_14](https://doi.org/10.1007/978-1-0716-1787-8_14)
29. Ildiz, G. O., Bayari, S., Yorguner, N., Fausto, R., *Blood Serum Infrared Spectra Based Chemometric Models for Auxiliary Diagnosis of Autism Spectrum Disorder*, in *Neural Engineer Techniques for Autism Spectrum Disorder*, El-Baz, A. S., Mahmoud, A., Eds., Vol 1: Imaging and Signal Analysis, Elsevier, Amsterdam (Holland), Cap. 10, pp 185-213.  
ISBN: 9780128228227.
30. Campos M.G., Anjos, O., Ahmad, S., Chap. 9 - *Prevention of side effects from chemoradiotherapy and antitumor potential of royal jelly and its components: A systematic review*, Editor(s): Dilek Boyacioglu, in *Bee Products and Their Applications in the Food and Pharmaceutical Industries*, Academic Press, (2022), pp 221-244,  
ISBN 9780323854009;  
DOI: 10.1016/B978-0-323-85400-9.00007-1.
31. Florença S.G., Anjos, O., Ferreira, M., Campos, M.G., Estevinho, L. M., Correia, P., Costa, C.A., Guiné, R.P.F. (2022) *Therapeutic Potential Applications for Bee Pollen*. In *Huijs M (Ed) Food Processing – Advances in Research and Applications*, Chap. 6, pp. 143-165, Nova Science Publishers, Inc., USA (2022)  
ISBN: 978-1-68507-570-5  
DOI: 10.52305/BEEN9615
32. Gerales, C.F.G.C., *Diagnostic Imaging Applications of Inorganic Nanomaterials*, in *Biomedical Applications of Inorganic Materials*, Williams, G. R., Ed., *Inorganic Materials Series No. 10*, The Royal Society of Chemistry, London, Cap. 3, pp. 127-193 2022  
DOI: 10.1039/9781788019293; ISBN: 978-1-78801-606-3
33. Piochi, L.F.; Gaspar, A.T.; Rosário-Ferreira, N.; Preto, A.J.; Moreira, I.S.. "From single-omics to interactomics: How can ligand-induced perturbations modulate single-cell phenotypes?". In *Advances in Protein Chemistry and Structural Biology: Protein Interaction Networks*, 45-83. Elsevier, pp. 45-83, 2022  
DOI: 10.1016/bs.apcsb.2022.05.006; ISBN: 9780323992312
34. Barreto, C. A. V.; Baptista, S. J.; Buerschbell, B.; Magalhães, P.; Preto, A. J.; Lemos, A.; Rosário-Ferreira, N.; Schiedel A.; Machuqueiro, M.; Melo, R.; Moreira, I. S., *Arrestin and G protein interactions with GPCRs: a structural perspective*, *GPCRs as Therapeutic Targets*, Wiley Online Library, pp. 109-179, 2022  
DOI: 10.1002/9781119564782.ch5; ISBN: 9781119564782

35. Sérgio P. J. Rodrigues. *A química na reforma Pombalina*. In “*Redes Científicas da Universidade de Coimbra no Iluminismo*,” Imprensa da Universidade de Coimbra, 2022, pp. 397-410.  
DOI: [https://doi.org/10.14195/978-989-26-2263-7\\_13](https://doi.org/10.14195/978-989-26-2263-7_13)
36. Sérgio P. J. Rodrigues.. *Acerca das Contribuições da Química para os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável das Nações Unidas – Atualização de 2022*. In “Meio ambiente: princípios ambientais, preservação e sustentabilidade 3”, Atena, 2022. pp.1-12.  
DOI: <https://doi.org/10.22533/at.ed.3182229031>
37. Sérgio P. J. Rodrigues. *Associação Entre Loucura e Criatividade: o Que Dizem as Evidências*. In “História Interdisciplinar da Loucura, Psiquiatria e Saúde Mental XII.” Ana Leonor Pereira, João Rui Pita (Eds.) Coimbra: Sociedade de História Interdisciplinar da Saúde, 2022, pp. 605-612.  
ISBN: 978-989-54537-9-5
38. *Structure and Dynamics of Atmospheric, Plasma and Astrochemical Molecular Processes*, B. R. L. Galvão, T. Mondal, P. J. S. B. Caridade and A. J. C. Varandas, Eds., Volume 10, Front. Phys., Sec. Physical Chemistry and Chemical Physics, Volume 10 (2022).
39. *Kinetics and Modeling of Molecular Reactions*, P. J. S. B. Caridade, C. Serpa and S. P. J. Rodrigues, Eds, Applied Science (2022).

### **COLABORAÇÃO NA EDIÇÃO DE LIVRO**

1. Sérgio P. J. Rodrigues Colaboração na edição do livro de homenagem ao professor Andrade Gouveia: Sebastião J. Formosinho, Hugh D. Burrows (Eds.) António Jorge Andrade de Gouveia. *A Piece of Portuguese Chemistry*. Imprensa da Universidade de Coimbra, 2022.
2. Abílio José F. N. Sobral Revisão Científica de Porto Editora: “EXPERIMENTA 8”, Manual de Ciências Físico-químicas para o 8º ano de escolaridade. Autores: Duarte Nuno Januário, Eliana do Carmo Correia e Carlos Brás. Revisores Científicos: Paulo Simeão Carvalho (Física) e Abílio José F. N. Sobral (Química). EM IMPRESSÃO em 2022.

**Articles in International Peer-Reviewed Journals (181)**

1. Chambel, A., Sanati, A. L., Lopes, P. A., Nikitin, T., Fausto, R., de Almeida, A. T., Tavakoli, M., *Laser Writing of Eutectic Gallium–Indium Alloy Graphene-Oxide Electrodes and Semitransparent Conductors*, *Adv. Mater. Technol.*, 7, Art. N. 2101238, 2022.  
DOI: 10.1002/admt.202101238
2. Lopes Jesus A. J., Nunes, C. M., Reva, I., *Conformational Structure, Infrared Spectra and Light-Induced Transformations of Thymol Isolated in Noble Gas Cryomatrices*, *Photochem.*, 2, pp. 405–422, 2022.  
DOI: 10.3390/photochem2020028
3. Fausto, R., Ildiz, G. O., Nunes, C. M., *IR-induced and Tunneling Reactions in Cryogenic Matrices: The (Incomplete) Story of a Successful Endeavor*, *Chem. Soc. Rev.*, 51, pp. 2853-2872, 2022.  
DOI: 10.1039/D1CS01026C
4. Sıdır, İ., Gülseven Sıdır, Y., Góbi, S., Berber, H., Ildiz, G. O., Fausto, R., *UV-Induced –OCH<sub>3</sub> Rotamerization in a Matrix-Isolated Methoxy-Substituted Ortho-Hydroxyaryl Schiff Base*, *Photochem. Photobiol. Sci.*, 21, pp. 835-847, 2022.  
DOI: 10.1007/s43630-021-00166-z
5. Sanati, A. L., Chambel, A., Lopes, P. A., Nikitin, T., Fausto, R., Tavakoli, M., *Laser-Assisted Rapid Fabrication of Large Scale Graphene Oxide Transparent Conductors*, *Adv. Mater. Interfaces*, 9, Art. N. 2102343, 2022.  
DOI: 10.1002/admi.202102343
6. Nogueira, B. A., Carvalho, M., Paixão, J. A., Eusébio, M. E. S., Lopes, S. M. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Fausto, R., *Portrayal of the Color Polymorphism in the 5-Acetyl-derivative of ROY*, *CrystEngCom*, 24, pp. 1459-1474, 2022.  
DOI: 10.1039/d1ce01601f
7. Brito, A. L. B., Brüggem, C., Ildiz, G. O., Fausto, R., *Investigation of Menopause-induced Changes on Hair by Raman Spectroscopy and Chemometrics*, *Spectrochim. Acta A*, 275, Art.N. 121175, 2022.  
DOI: 10.1016/j.saa.2022.121175
8. Nunes, C. M., Pereira, N. A. M., Fausto, R., *Photochromism of a Spiropyran in Low-Temperature Matrix. Unprecedented Bidirectional Switching Between a Merocyanine and an Allene Intermediate*, *J. Phys. Chem. A*, 126, pp. 2222-2233, 2022.  
DOI: 10.1021/acs.jpca.2c01105
9. Jaleh, B., Hamzehi, S., Sepahvand, R., Azizian, S., Eslamipناه, M., Golbedaghi, R., Meidanchi, A., Fausto, R., *Preparation of Polycarbonate-ZnO Nanocomposite Films: Surface Investigation After UV Irradiation*, *Molecules*, 27, pp. 4448-4461, 2022.  
DOI: 10.3390/molecules27144448
10. Nogueira, B. A., Lopes, S. M. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Paixão, J. A., Milani, A., Castiglioni, C., Fausto, R., *Molecular and Crystal Structures of N-Picryl-m-phenolidine and Investigation of Single Crystal Polarized Raman Spectra*, *J. Mol. Struct.*, 1262, Art. N. 133111, 2022.  
DOI: 10.1016/j.molstruc.2022.133111
11. Karadag, A., Kaygısız, E., Nikitin, T., Aysal, N., Ildiz, G. O., Fausto, R., *Micro-Raman Spectroscopy and X-ray Diffraction Analyses of the Core and Shell Compartments of an Iron-Rich Fulgurite*, *Molecules*, 27, pp. 3053-3070, 2022.  
DOI: 10.3390/molecules27103053
12. Nikitin, T., Lopes, S., Fausto, R., *Matrix Isolation Study of Fumaric and Maleic Acids in Solid Nitrogen*, *J. Phys. Chem. A*, 126, pp. 4392-4412, 2022.  
DOI: 10.1021/acs.jpca.2c02770
13. Sıdır, İ., Gultseven Sıdır, Y., Berber, H., Fausto, R., *Solvato-, Thermo- and Photochromism in a New Diazo Diaromatic Dye: 2-(p-Tolyldiazenyl)naphthalen-1-amine*, *J. Mol. Struct.*, 1267, Art. N. 133595, 2022.



DOI: 10.1016/j.molstruc.2022.133595

14. Sidir, İ., Gultseven Sidir, Y., Góbi, S., Berber, H., Fausto, R., *UV-Induced Benzyloxy Rotamerization in a ortho OH-Substituted Aryl Schiff Base*, *Photochem*, 2, pp. 376-390, 2022.

DOI: 10.3390/photochem2020026

15. Fateixa, S., Nogueira, H. I. S., Paixão, J. A., Fausto, R., Trindade, T., *Insightful Vibrational Imaging Study on the Hydration Mechanism of Carbamazepine*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 24, pp. 19502-19511, 2022.

DOI: 10.1039/D2CP02185D

16. Brito, A. L. B., Roque, J. P. L., Sidir, İ., Fausto, R., *Low-Temperature Infrared Spectra and UV-Induced Rotamerization of 5-Chlorosalicylaldehyde*, *J. Phys. Chem. A*, 126, pp. 5148-5159, 2022.

DOI: 10.1021/acs.jpca.2c03685

17. Amado, P. S. M., Lopes Jesus, A. J., Paixão, J. A., Fausto, R., Cristiano, M. L. S., *Unravelling the Structure of Peroxides with Antiparasitic Activity: Relative Impact of a Trioxolane or a Tetraoxane Pharmacophore on the Overall Molecular Structure*, *ChemPlusChem*, 87, Art. N. e202200207, 2022.

DOI: 10.1002/cplu.202200207

18. Nogueira, B. A., Reart, M., Fausto, R., Castiglioni, C., Dovesi, R., *Raman Activity of the Longitudinal Optical Phonons of the LiNbO3 Crystal. Experimental Determination and Quantum Mechanical Simulation*, *J. Raman Spectrosc.*, 53, pp. 1904-1914, 2022.

DOI: 10.1002/jrs.6426

19. Nunes, C. M., Doddipatla, S., Loureiro, G. F., Roque, J. P. L., Pereira, N. M. A., Pinho e Melo, T. M. V. D., Fausto, R., *Differential Tunneling-driven and Vibrationally-induced Reactivity in Isomeric Benzazirines*, *Chem. Eur. J.*, 28, Art. N. e202202306, 2022.

DOI: 10.1002/chem.202202306

20. Nogueira, B. A., Lopes, S. M. M., Milani, A., André, V., Paixão, J. A., Eusébio, M. E. S., Pinho e Melo, T. M. V. D., Duarte, T., Castiglioni, C., Fausto, F., *Color polymorphs of ROY-ol*, *Cryst. Growth Des.*, 22, pp. 5375-5389, 2022.

DOI: 10.1021/acs.cgd.2c00462

21. Nunes, C. M., Roque, J. P. L., Doddipatla, S., Wood, S. A., McMahon, R. J., Fausto, R., *Simultaneous Tunneling Control in Conformer Specific Reactions*, *J. Am. Chem. Soc.*, 144, pp. 20866-20874, 2022.

DOI: 10.1021/jacs.2c09026

22. Doddipatla, S., Ferreira, G. I., Gülseven Sidir, Y., Nunes, C. M., Fausto, R., *Breaking and Forming of Intramolecular Hydrogen Bonds in Dihydroxybenzaldehydes through UV-induced Conformational Changes in Low-temperature Matrix*, *J. Phys. Chem. A*, 126, pp. 8645-8657, 2022.

DOI: 10.1021/acs.jpca.2c05839

23. Ivanov, M. S., Nikitin, T., Lopes, S., Xu, J., Duan, Y., Fausto, F., Paixão, J. A., Vilarinho, P. M., Rasing, Th., Semin, S., *Thickness Dependent High-temperature Piezo- and Ferroelectricity in a Fluorenone-based Molecular Crystal*, *Adv. Mater. Interfaces*, 9, Art. N. 2201103, 2022.

DOI: 10.1002/admi.202201103

24. Lopes Jesus, A. J., Júnior, J. R. L., Fausto, R., Reva, I., *Infrared Spectra and Phototransformations of meta-Fluorophenol Isolated in Argon and Nitrogen Matrices*, *Molecules*, 27, pp. 8248-8267, 2022.

DOI: 10.3390/molecules27238248

25. Pal, K., Thomas, S., Fausto, R., *Nanoarchitectonics: From Molecules to Advanced Nanomaterials*, *J. Mol. Struct.*, 1270, Art. N. 134003, 2022.

DOI: 10.1016/j.molstruc.2022.134003

26. Costa, T., Knaapila, M., Stewart, B., Ramos, M. L., Justino, L. L. G., Valente, A. J. M., Dalglish, R., Rogers, S. E., Kraft, M., Allard, S., Scherf, U., Burrows, H. D., *Nanostructuring with Surfactants: The Self-Assembly of a New Poly(thiophene-phenylene) Conjugated Polymer Bearing Azacrown Ether Pendant Groups*, *Langmuir*, 38, pp. 11845-11859, 2022.

DOI: 10.1021/acs.langmuir.2c01246

27. Ildiz, G. O., Tabanez, A. M., Nunes, A., Roque, J. P. L., Justino L. L. G., Ramos, M. L., Fausto, R., *Molecular structure, spectroscopy and photochemistry of alprazolam*, *J. Mol. Struct.*, 1247, Art. N. 131295, 2022.

DOI: 10.1016/j.molstruc.2021.131295

28. Santos, J. A. V., Baptista, J. A., Santos, I. C., Maria, T. M. R., Canotilho, J., Castro, R. A. E., Eusébio, M. E. S., *Pharmaceutical nanocrystal synthesis: a novel grinding approach*, *CrystEngComm* 24, pp 947-961, 2022. “[Magazine cover](#)” – Volume 24, number 5.

DOI: 10.1039/D1CE00407G

29. Gałazkaa, M., Jasiurkowska-Delaporte, M., Eusébio, M.E.S., Rosado, M.T.S., Juszyńska-Gałazka, E., Dryzek, E., *Study on molecular dynamics and phase transitions in 1,2-cyclohexanediol and 1,3-cyclohexanediol isomers by calorimetric and dielectric spectroscopy*, *J. Mol. Liq.*, 2022.

DOI: [10.1016/j.molliq.2022.120874](https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.120874)

30. Cardoso, M. A. Correia, S.F.H.; Goncalves, H.M.R.; Pereira, R.F.P., Maria, T.M.R.; Silva, M.M.; Valente, A.J.M.; Fortunato, E. Ferreira, R.A.S., Rute A. S., Bermudez, V.D., *Solar spectral management with electrochromic devices including PMMA films doped with biluminescent ionosilicas*, *J. Sol-Gel Sci. Technol.*, 101, pp. 58-70, 2022.

DOI: 10.1007/s10971-021-05612-z

31. C. S. Lobo, P. Rodrigues-Santos, D. Pereira, J. Núñez, J. C. D. Trêpa, D. L. Sousa, J. V. Lourenço, M. F. Coelho, L. P. Almeida, J. S. Cunha, L. G. Arnaut, *Photodynamic disinfection of SARS-CoV-2 clinical samples using a methylene blue formulation*, *Photochem. Photobiol. Sci.*, 21, pp 1101-1109, 2022.

DOI: 10.1007/s43630-022-00202-6

32. S. Melo-Guímaro, R. Cardoso, C. João, J. Santos, E. Melro, L. G. Arnaut, J. Pereira, C. Serpa, *Efficient dermal delivery of ascorbic acid 2-glucoside with photoacoustic waves* *Int. J. Cosmetic Sci.*, 44, pp. 453-463, 2022.

DOI: 10.1111/ics.12793

33. R. T. Aroso, L. D. Dias, K. C. Blanco, J. M. Soares, F. Alves, G. J. da Silva, L. G. Arnaut, V. S. Bagnato, M. M. Pereira, *Synergic Dual Phototherapy: Cationic imidazolyl photosensitizers and ciprofloxacin for eradication of in vitro and in vivo E. coli infections*, *J. Photochem. Photobiol. B Biol.*, 233, 112499, 2022.

DOI: [10.1016/j.jphotobiol.2022.112499](https://doi.org/10.1016/j.jphotobiol.2022.112499)

34. C. Donohoe, F. A. Schaberle, F. M. S. Rodrigues, N. Gonçalves, C. J. Kingsbury, M. M. Pereira, M. O. Senge, L. C. Gomes-da-Silva, L. G. Arnaut, *Unravelling the pivotal role of atropisomerism for cellular internalization*, *J. Am. Chem. Soc.*, 144, pp. 15252-15265, 2022.

DOI: [10.1021/jacs.2c05844](https://doi.org/10.1021/jacs.2c05844)

35. R. T. Aroso, G. Piccirillo, L. D. Dias, S. M. A. Pinto, L. G. Arnaut, M. M. Pereira, *Synthesis of Photosensitizers Based On Tetrapyrrolic Macrocycles for Combination with Antibiotics: Dual Inactivation of Bacteria*, *ChemPlusChem*, e202200228, 2022.

DOI: 10.1002/cplu.202200228

36. M. I. P. Mendes, L. G. Arnaut, *Redaporfin Development for Photodynamic Therapy and its Combination with Glycolysis Inhibitors*, *Photochem. Photobiol.*, online, 2022

DOI: 10.1111/php.13770

37. O. A. Chaves, B. A. Iglésias, C. Serpa, *Biophysical Characterization of the Interaction between a Transport Human Plasma Protein and the 5,10,15,20-tetra(pyridine-4-yl)porphyrin*, *Molecules*, 27, 5341, 2022.

DOI: 10.3390/molecules27165341

38. Piotr Gierlich, Luís Rodrigues, Fábio A. Schaberle, Susan Callaghanb, Lígia C. Gomes-da-Silva and Mathias O. Senge *Trimethoxyphenyl-BODIPYs as probes for lysosome staining* *Journal of Porphyrins and Phthalocyanines.*, Vol. 26, No. 08n09, pp. 573-584 (2022)

DOI: 10.1142/S1088424622500328.

39. Claire Donohoe, Stéphanie Leroy-Lhez, Mathias O. Senge, Lígia C. Gomes-da Silva. *POLYTHEA - The opportunities and challenges of doctoral training networks*. Journal of Porphyrins and Phthalocyanines. 2022 April, Vol. 26, No. 08n09, pp. 527-532 (2022)  
DOI: 10.1142/S1088424622500250.
40. Schaberle FA, Gomes-da-Silva LC. *A network representation of photodynamic therapy aiming the integration of knowledge and boosting clinical acceptance*. Photodiagnosis Photodyn Ther.;37:102715. March 2022.  
DOI: 10.1016/j.pdpdt.2022.102715.
41. Piccirillo, G., Maldonado-Carmona, N., Marques, D. L., Villandier, N., Calliste, C. A., Leroy-Lhez, S., Eusébio, M. E. S., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., *Porphyrin@Lignin nanoparticles: Reusable photocatalysts for effective aqueous degradation of antibiotics*, Catal. Today, 2022, em impressão. DOI: 10.1016/j.cattod.2022.09.009
42. Gawne, P. J., Pinto, S. M. A., Nielsen, K. M., Keeling, G. P., Pereira, M.M., Rosales, R. T. M., *Microwave-assisted synthesis of [<sup>52</sup>Mn]Mn-porphyrins: Applications in cell and liposome radiolabeling*, Nucl. Med. Biol., 114, pp 6, 2022. DOI: 10.1016/j.nucmedbio.2022.08.006.
43. Tomé, V. A., Neves, A. C. B., Pinto, S. M. A., Rodrigues, F. M. S., Calvete, M. J. F., Alves, V. H. P., Sereno, J., Abrunhosa, A. J., Pereira, M. M., *Stable [64Cu]-labelled phthalocyanine choline bioconjugate for development of a potential cancer PET probe. In vivo biodistribution evaluation*, 26, pp 376, 2022. DOI: 10.1142/S1088424622500298.
44. Felgueiras, A. P., Rodrigues, F. M. S., Carrilho, R. M. B., Cruz, P. F., Rodrigues, V. H., Kégl, T. Kollár, L., Pereira, M. M., *Stereoisomeric Tris-BINOL-Menthol Bulky Monophosphites: Synthesis, Characterisation and Application in Rhodium-Catalysed Hydroformylation*, Molecules, 27, pp 1989, 2022. DOI: [10.3390/molecules27061989](https://doi.org/10.3390/molecules27061989)
45. Reguero, M., Claver, C., Carrilho, R. M. B., Masdeu-Bultó, A. M., *Immobilized Molecular Catalysts for CO<sub>2</sub> Photoreduction*, Adv. Sustain. Syst., 6, pp 2100493, 2022. DOI: [10.1002/advsu.202100493](https://doi.org/10.1002/advsu.202100493)
46. Alves, L. S., Marques, A. R. A., Padrão, N., Carvalho, F. A., Ramalho, J., Lopes, C., Soares, M. I. L., Futter, C.E., Pinho e Melo, T. M. V. D., Santos, N. C., Vieira, O. V., *Cholesteryl hemiazelate causes lysosome dysfunction impacting vascular smooth muscle cells homeostasis*, J. Cell. Sci., 135, pp jcs254631, 2022.  
DOI: 10.1242/jcs.254631
47. Ferreira, M. B., Pereira, N. A. M., Marto, C. M., Cardoso, M., Amaro, I., Coelho, A., Sousa, J., Spagnuolo, G., Ferreira, M. M., Marta Piñeiro, Pinho e Melo, T. M. V. D., Botelho, M. F., Carrilho, E., Paula, A., Laranjo, M., *Isolation and Identification of Cytotoxic Compounds Present in Biomaterial Life®*, Materials, 15, pp 871, 2022.  
DOI: 10.3390/ma15030871
48. Lopes, S. M. M., Lemos, A., Paixão, J. A., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Ethyl 7-acetyl-8α-methyl-3-(1-phenyl-1H-tetrazol-5-yl)-1,4,4a,5,6,8a-hexahydro-7H-pyrano[2,3-c]pyridazine-1-carboxylate*, Molbank, M1338, 2022.  
DOI: 10.3390/M1338
49. Alves, A. J. S., Alves, N. G., Laranjo, M., Gomes, C. S. B., Gonçalves, A. C., Sarmento-Ribeiro, A. B., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Insights into the Anticancer Activity of Chiral Alkylidene-β-Lactams and Alkylidene-γ-Lactams: Synthesis and Biological Investigation*, Bioorg Med. Chem., 63, pp 116738, 2022.  
DOI: 10.1016/j.bmc.2022.116738
50. Laranjo, M., Pereira, N. A. M., Oliveira, A. S. R., Aguiar, M. C., Brites, G., Nascimento, B. F. O., B. Serambeque, B., Costa, B. D. P., Pina, J., Seixas de Melo, J. S., Pineiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Ring-fused meso-Tetraarylchlorins as Auspicious PDT Sensitizers: Synthesis, Structural Characterization, Photophysics and Biological Evaluation*, Front. Chem., 10, pp 873245, 2022.  
DOI: 10.3389/fchem.2022.873245
51. Barros, G., Serambeque, B., Carvalho, M. J., Marto, C. M., Pineiro, M., Pinho e Melo, T. M. V. D.,

- Botelho, M. F., Laranjo, M., *Applications of photodynamic therapy in endometrial diseases*, *Bioengineering*, 9, pp 226, 2022.  
DOI: 10.3390/bioengineering9050226
51. Alves, A. J. S., Alves, N. G., Bártolo, I., Fontinha, D., Caetano, S., Prudêncio, M., Taveira, N., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Unveiling a family of spiro- $\beta$ -lactams with anti-HIV and anti-plasmodial activity via phosphine-catalyzed [3+2] annulation of 6-alkylidene-penicillanates and allenates*, *Front. Chem.*, 10, pp 1017250, 2022.  
DOI: 10.3389/fchem.2022.1017250
52. Alves, A. J. S., Silvestre, J. A. D., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Synthesis of Novel Chiral Spiro- $\beta$ -Lactams from Nitrile Oxides and 6-(Z)-(Benzoylmethylene)penicillanate: Batch, Microwave-Induced and Continuous Flow Methodologies*, *RSC Adv.*, 12, pp 30879 – 30891, 2022.  
DOI: 10.1039/d2ra04848e
53. Bártolo, I., Moranguinho, I., Gonçalves, P., Diniz, A. R., Borrego, P., Martin, F., Figueiredo, I., Gomes, P., Gonçalves, F., Alves, A. J. S., Alves, N. G., Caixas, U., Pinto, I. V., Barahona, I., Pinho e Melo, T. M. V. D., Taveira, N., *High instantaneous inhibitory potential of bictegravir and the new spiro- $\beta$ -lactam BSS-730A for HIV-2 isolates from RAL-naïve and RAL-failing patients*, *Int. J. Mol. Sci.*, 23, pp 14300, 2022.  
DOI: 10.3390/ijms232214300
54. Ribeiro, J. L. P., Loureiro, J. B., Lopes, S. M. M., Saraiva, L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *3-(1,2,3-Triazol-4-yl)- $\beta$ -Carbolines and 3-(1H-Tetrazol-5-yl)- $\beta$ -Carbolines: Synthesis and Evaluation as Anticancer Agents*, *Pharmaceuticals*, 15, pp 1510, 2022. [Special issue “State-of-the-art of Medicinal Chemistry in Portugal”]  
DOI: 10.3390/ph15121510
55. Pereira, P. A., Serra, M. E. S., Serra, A. C., Coelho, J. F. J., *Application of vinyl polymer-based materials as nucleic acids carriers in cancer therapy*, *Wiley Interdiscip. Rev. Nanomed. Nanobiotechnol.*, 14, pp e1820, 2022.  
DOI: 10.1002/wnan.1820
56. Tavares, N. C. T., Cacho, V. R. G., Costa, D. C. S., Nunes, S. C. C., Pais, A. A. C. C., Murtinho, D., Serra, M. E. S., *Deciphering the mechanism behind efficient enantioselective ethylation with thiazolidine-based amino alcohols*, *Appl Organomet Chem*, 36, pp e6567, 2022.  
DOI: 10.1002/aoc.6567
57. Machado, T. F., Santos, F. A., Pereira, R. F. P., Bermudez, V. Z., Valente, A. J. M., Serra, M. E. S., Murtinho, D.,  *$\beta$ -Ketoenamine Covalent Organic Frameworks—Effects of Functionalization on Pollutant Adsorption*, *Polymers*, 14, pp 3096, 2022.  
DOI: 10.3390/polym14153096
58. Ferreira, A. C. S., Aguado, R., Carta, A. M. M. S., Bértolo, R., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Insights into Gum Arabic interactions with cellulose: Strengthening effects on tissue paper*, *Mater. Today Commun.*, 31, pp 103706, 2022.  
DOI: 10.1016/j.mtcomm.2022.103706
59. Valente, A. J. M., Pirozzi, D., Cinquegrana, A., Utzeri, G., Murtinho, D., Sannino, F., *Synthesis of  $\beta$ -cyclodextrin-based nanosponges for remediation of 2,4-D polluted waters*, *Environ. Res.*, 215, 114214, 2022.  
DOI: 10.1016/j.envres.2022.114214
60. Utzeri, G., Matias, P. M. C., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Cyclodextrin-Based Nanosponges: Overview and Opportunities*, *Front. Chem.*, 10, pp 1–25, 2022.  
DOI: 10.3389/fchem.2022.859406
61. Aguado, R., Ferreira, A. C. S., Gramacho, S., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Crosslinking of surface-sizing starch with cyclodextrin units enhances the performance of paper as essential oil carrier*, *Nord Pulp Paper Res J*, 37, pp 413–421, 2022.  
DOI: 10.1515/npprj-2022-0034
62. Ferreira, A. C. S., Aguado, R., Carta, A. M. M. S., Bértolo, R., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Influence of DNA as additive for market pulp on tissue paper*, *Nord Pulp Paper Res J*, 37, pp 489–496, 2022.  
DOI: 10.1515/npprj-2022-0016

63. Sharma, M., Aguado, R., Murtinho, D., Valente, A.J.M., Ferreira, P.J.T., *Micro-/Nanofibrillated Cellulose-Based Coating Formulations: A Solution for Improving Paper Printing Quality*, *Nanomaterials*, 12, pp 1–18, 2022.  
DOI: 10.3390/nano12162853
64. Sharma, M., Aguado, R., Valente, A., Murtinho, D., Ferreira, P., *Dynamic Penetration Profile of Starch Betainate, Pluronic and PCC Coated Papers*, *KnE mater. sci.*, pp 244–250, 2022.  
DOI: 10.18502/kms.v7i1.11629
65. Ferreira, A.C.S., Aguado, R., Bértolo, R., Carta, A.M.M.S., Murtinho, D., Valente, A.J.M., *Enhanced water absorption of tissue paper by cross-linking cellulose with poly(vinyl alcohol)*, *Chem. Pap.*, 76, pp 4497–507, 2022.  
DOI: 10.1007/s11696-022-02188-y
66. Rénio, M., Murtinho, D., Ventura, M.R., *New bifunctional 1,3-diamine organocatalysts derived from (+)-camphoric acid for asymmetric Michael addition of 1,3-dicarbonyl compounds to nitroolefins*, *Chirality*, 34, pp 782–795, 2022.  
DOI: 10.1002/chir.23424
67. Utzeri, G., Murtinho, D., Maria, T.M.R., Pais, A.A.C.C., Sannino, F., Valente, A. J. M., *Amine- $\beta$ -cyclodextrin-based nanosponges. The role of cyclodextrin amphiphilicity in the imidacloprid uptake*, *Colloids Surf. A Physicochem. Eng. Asp.*, 635, 128044, 2022.  
DOI: 10.1016/j.colsurfa.2021.128044
68. Cabral, A. M. T. D. P. V., Fernandes, A. C. G., Joaquim, N. A. M., Veiga, F., Sofio, S. P. C., Paiva, I., Estes, M. A., Rodrigo, M. M., Valente, A. J. M., Ribeiro. A. C. F., *Complexation of 5-Fluorouracil with  $\beta$ -Cyclodextrin and Sodium Dodecyl Sulfate: A Useful Tool for Encapsulating and Removing This Polluting Drug*, *Toxics*, 10, pp 300, 2022.  
DOI: 10.3390/toxics10060300
69. Rodrigo, M. M., Valente, A. J. M., Estes, M. A., Cabral, A. M. T. D. P. V., Ribeiro. A. C. F., *Ternary diffusion in aqueous sodium salicylate+sodium dodecyl sulfate solutions*, *J. Chem. Thermodyn.*, 174, pp 106859, 2022.  
DOI: 10.1016/j.jct.2022.106859
70. Fangaia, S. I. G., Cabral, A. M. T. D. P. V., Nicolau, P. M. G., Guerra, F. A. D. R. A., Rodrigo, M. M., Ribeiro. A. C. F., Valente, A. J. M., Estes, M. A., *Diffusion of Vanadium Ions in Artificial Saliva and Its Elimination from the Oral Cavity by Pharmacological Compounds Present in Mouthwashes*, *Biomolecules*, 12(7), pp 947, 2022.  
DOI: 10.3390/biom12070947
71. Rodrigo, M. M., Cabral, A. M. T. D. P. V., Nicolau, P. M. G., Ribeiro. A. C. F., Valente, A. J. M., Fangaia, S. I. G., Estes, M. A., *Effect of potassium dihydrogen citrate on the diffusion behaviour of citric acid*, *J. Chem. Thermodyn.*, 179, pp 106996, 2022.  
DOI: 10.1016/j.jct.2022.106996  
Available online: 24 December 2022
72. Brandão, P., Pineiro, M., Burke, A. J., *Tryptanthrin and its derivatives in drug discovery: synthetic insights*, *Synthesis*, 54(19), pp 4235-4245, 2022.  
DOI: 10.1055/s-0040-171990
73. Burke, A.J., *Asymmetric organocatalysis in drug discovery and development for active pharmaceutical ingredients*, *Expert Opin Drug Discov*, no prelo, 2022.  
DOI: 10.1080/17460441.2023.2160437
74. Carreiro, E.P., Ernesto, S., Gastalho, C., Costa, A. R., Antunes, C. M., Burke, A. J. *Synthesis and Antiproliferative Activity of Novel Quercetin-1,2,3-Triazole Hybrids using the 1,3-Dipolar Cycloaddition (Click) Reaction*, *Synthesis*, 54, pp 4272-4284, 2022.  
DOI: 10.1055/s-0040-1719928

75. Amorim, A. C., Fonseca, D. P., Carreiro, E. P., Hermann, G. J., Federsel, H. J., Burke, A. J. *Immobilization of Functionalized epi-Cinchonine Organocatalysts on Controlled Porous Glass-Beads: Applications in Batch and Continuous Flow*, *Synlett*, 33(17), pp 1756-1762, 2022.  
DOI: 10.1055/a-1916-4858
76. Soares, M. I. L., Cardoso, A. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Diels–Alder Cycloaddition Reactions in Sustainable Media*, *Molecules*, 27, pp 1304, 2022.  
DOI: 10.3390/molecules27041304
77. Cunha, C., Pinto, A., Galvão, A., Rodríguez, L., Seixas de Melo, J. S., *Aggregation-Induced Emission with Alkynylcoumarin Dinuclear Gold(I) Complexes: Photophysical, Dynamic Light Scattering, and Time-Dependent Density Functional Theory Studies*, *Inorg. Chem.*, 61, 18, 6964–6976, 2022.  
DOI: 10.1021/acs.inorgchem.2c00366
78. Delgado-Pinar, E., Pont I., García-España, E., Seixas de Melo, J. S., *Cucurbituril hosts as promoters of aggregation induced emission of triphenylamine derivatives*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 24, 2403-2411, 2022.  
DOI: 10.1039/D1CP04821J
79. Cunha, C., Peixoto, M. S., Santos, J., Abreu, P.E., Paixão, J. A., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *Practical Design of 3,6-Di-tert-butylidiphenyldibenzofulvene Derivatives with Enhanced Aggregation-Induced Emission*, *ACS Applied Optical Materials*, 2022.  
<https://doi.org/10.1021/acsaom.2c00067>
80. Ferreira, S. C. R., Franchi, M., Pais, A. A. C. C., Seixas de Melo, J. S., *The chemistry behind the first Portuguese postage stamps (1853–1894). A non-destructive analytical and chemometric analysis of pigments, fillers and binders*, *Dyes and Pigments* 205, 110519, 2022.  
<https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2022.110519>
81. Pinheiro, D., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *Tryptanthrin derivatives as efficient singlet oxygen sensitizers*, *Photochem. Photobiol. Sci.* 21, 645-658, 2022.  
DOI: 10.1007/s43630-021-00117-8
82. Costa, A. L., Monteiro, R. p., Barradas, P. D. N., Ferreira, S. C. R., Cunha, C., Gomes, A. C., Gonçalves, I. S., Seixas de Melo, J. S., Pillinger, M., *Enhanced thermal and photo-stability of a para-substituted dicumyl ketone intercalated in a layered double hydroxide*, *Front. Chem.*, 10, 2022.  
DOI=10.3389/fchem.2022.1004586
83. Pinto, C. M., Pina, J., Delgado-Pinar, E., Seixas de Melo, J. S., *Excited state deactivation mechanisms in Shikonin rationalized from its naphthoquinone parent structures*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 24, 20348-20356, 2022.  
DOI: 10.1039/d2cp01829b
84. Rodrigues, A. C. B., Peixoto, M., Gomes, C., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *Aggregation-Induced Emission Leading to White Light Emission in Diphenylbenzofulvene Derivatives*, *Chem. Eur. J.*, 28, e202103768, 2022.  
DOI: 10.1002/chem.202103768
85. Ramos, M. L., Justino, L. L. G., Barata, R., Costa, T., Burrows, H. D. *Complexes of In(iii) with 8-hydroxyquinoline-5-sulfonate in solution: structural studies and the effect of cationic surfactants on the photophysical behaviour*, *Dalton Trans.* 50, 46, 16970-16983, 2021.  
DOI: 10.1039/D1DT02858H.
86. Gonçalves, R. C. R., Belmonte-Reche, E., Pina, J., Costa da Silva, M., Pinto, S. C. S., Gallo, J., Costa Susana, P. G., Raposo, M. M. M., *Bioimaging of Lysosomes with a BODIPY pH-Dependent Fluorescent Probe*, *Molecules*, 27, 8065, 2022.  
DOI: 10.3390/molecules27228065
87. Alves, A. A. S., Sousa, F. J. P. M., Sebastiao, M., Antunes, F. E., *Influence of electrolytes on the structural and viscosity properties of mixed anionic–nonionic–zwitterionic surfactants in detergent formulations*, *J. Surfactants Deterg.*, 2022, in press.

DOI: 10.1002/jsde.12613

88. Cordeiro, R., Henriques, M., Silva, J. C., Antunes, F., Alves, N., Moura, C., *Corncob Cellulose Scaffolds: A New Sustainable Temporary Implant for Cartilage Replacement*, *J. Funct. Biomater.*, 13,63,2022.

DOI: 10.3390/jfb13020063

89. Teles, F., Antunes, F., *Novel ranking framework for retrospective simultaneous assessment of fire and mechanical performances of natural fiber-reinforced polymeric composites: Literature update from the previous decade*, *J. Vinyl Addit. Technol.*, 105466, 2022.

DOI: 10.1002/vnl.21908

90. Teles, F., Martins, G., Antunes, F., *Fire retardancy in nanocomposites by using nanomaterial additives*, *J. Anal. Appl. Pyrolysis*, 105466, 2022.

DOI: 10.1016/j.jaap.2022.105466

91. Simões, A. M., Venancio, C., Aves, L., Antunes, F. E., Lopes, L., *Ecotoxicity of cationic cellulose polymers to aquatic biota: The influence of charge density*, *Sci. Total Environ.*, 806, 150560, 2022.

DOI: 10.1016/j.scitotenv.2021.150560

92. Silva, C. V. M., Santos, J. R. C., Rodrigo, M. M., Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., Abreu, P. E., Marques, J. M. C., Esteso, M. A., *On the transport and dynamics of disaccharides: H-bonding effect in sucrose and sucralose*, *J. Mol. Liquids*, 345, 117855, 2022.

DOI: 10.1016/j.molliq.2021.117855

93. Fangaia, S. I. G., Nicolau, P. M. G., Guerra, F. A. D. R. A., Rodrigo, M. M., Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., Santos, J. R. C., Marques, J. M. C., Esteso, M. A., *The behaviour of aluminium ions in artificial saliva and the impact of the chlorhexidine digluconate on its removal - A diffusion model*, *J. Mol. Liquids*, 353, 118749, 2022.

DOI: 10.1016/j.molliq.2022.118749

94. Vareda, J. P., Matos, P. D., Valente, A. J. M., Durães, L., *A new Schiff base organically modified silica aerogel-like material for metal ions adsorption with Ni selectivity*, *Adsorpt. Sci. Technol*, 8237403, 2022.

DOI: 10.1155/2022/8237403

95. Melro, E., Antunes, F. E., Valente, A. J. M., Duarte, H., Romano, A., Medronho, B., *On the development of phenol-formaldehyde resins using a new type of lignin extracted from pine wood with a levulinic-acid based solvent*, *Molecules*, 27, 2825, 2022.

DOI: 10.3390/molecules27092825

96. Aguado, R., Santos, A. R. M. G., Vallejos, S., Valente, A. J. M., *Paper-based probes with visual response to vapors from nitroaromatic explosives: polyfluorenes and tertiary amines*, *Molecules*, 27, 2900, 2022.

DOI: 10.3390/molecules27092900

97. Arnaiz, A., Guembe-García, M., Delgado-Pinar, E., Valente, A. J. M., Ibeas, S., García, J. M., Vallejos, S., *The role of polymeric chains as a protective environment for improving the stability and efficiency of fluorogenic peptide substrates*, *Scientific Reports*, 12, 8818, 2022.

DOI: 10.1038/s41598-022-12848-4

98. Pereira, J. C., Valente, A. J. M., Söderman, O.,  $\alpha$ -Cyclodextrin affects the acid-base properties of octanoic acid/sodium octanoate, *J. Mol. Liquids*, 2022, 364, 119955.

DOI: 10.1016/j.molliq.2022.119955

99. Ferreira, B., Sousa, S., Sousa, R. P. C. L., Costa, S. P. G., Raposo, M. M. M., Parpot, P., Valente, A. J. M., Pereira, R. F. P., Figueira, R. B., *Organic-inorganic hybrid sol-gel membranes for pH sensing in highly alkaline environment*, *Constr. Build. Mater.*, 360, 129493, 2022.

DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2022.129493

100. Prudente, F. V., Marques, J. M. C., *Thermodynamic Signatures of Structural Transitions and Dissociation of Charged Colloidal Clusters: A Parallel Tempering Monte Carlo Study*, *Molecules*, 27, 2581, 2022.

101. Marques, J. M. C., Prudente, F. V., Pirani, F., *Intermolecular Forces: From Atoms and Molecules to Nanostructures, Molecules*, 27, 2581, 2022.
102. Galindres, D. M., Cifuentes, D., Tinoco, L. E., Murillo-Acevedo, Y., Rodrigo; M. M., Ribeiro, A. C. F., *A Review of the Application of Resorcinarenes and SBA-15) in Drug Delivery, Processes* 10, 4, 684, 2022.  
DOI: 10.3390/pr10040684
103. Faro, M.P.R. T., Barros, M.C.F., Santos\*, C.I.A.V, Ribeiro, A.C.F., *Coupled mutual diffusion in aqueous calcium sulphate + sulphuric acid solutions, J. Chem.Thermodyn.*, 165, 106659, 2022,  
DOI 10.1016/j.jct.2021.106659
104. Santos, C. I. A. V., Barros, M. C. F., Ribeiro, A.C.F., *Diffusion of Ethanol in Supercritical Carbon Dioxide— Investigation of scCO<sub>2</sub>-Cosolvent Mixtures Used in Pharmaceutical Applications, Processes*, 10(4), 660, 2022  
DOI 10.3390/pr10040660
105. Santos, C. I. A. V., Barros, M. C. F., Ribeiro, A.C.F., Bou-Ali, M.N., Mialdun, A. \_ Shevtsova, V., *Transport properties of n -ethylene glycol aqueous solutions with focus on triethylene glycol-water, J. Chem. Phys.*, 156 (21), 214501, 2022  
DOI: 10.1063/5.0091902
106. Santos, C. I. A. V., Barros, M. C. F., Faro, M. P. T. R., Shevtsova, V., Ribeiro, A.C.F., *FTIR as Powerful Tool for Measurements of Diffusion in Supercritical Carbon Dioxide Using Taylor Dispersion Method, Processes*, 10(8), 1528, 2022.  
DOI:10.3390/pr10081528
107. Romero, C. M., Escamilla, A. P., Ribeiro, A. C. F., Estesó, M. A., *Effect of 1,2-propanediol on the critical micelle concentration of decyltrimethylammonium bromide at temperatures from (293.15 to 308.15) K, Int. J. Mol. Sci.*, 14, 23(24), 15884, 2022.  
DOI: 10.3390/ijms232415884
108. Ribeiro, A. C. F., Nicolau, P. M. G., Fangaia S. I. G., *Advanced Studies on Drug Delivery Systems: Characterization and its Impact on Pharmaceutical and Medicinal Areas), Processes*, 10, 2427, 2022.  
DOI: 10.3390/pr10112427
109. Aguirre, A. C., Mauricio Maldonado, Estesó, M. A., *Removal of Toxic Metal Ions Using Poly(BuMA-co-EDMA) Modified with C-Tetra(nonyl)calix[4]resorcinarene, Toxics*, 10, 204, 2022.  
DOI: 10.3390/toxics10050204
110. Suárez, A. F., Camargo, C. E., Estesó, M. A., Romero, C. M., *Photocatalytic degradation of dielectric mineral oil with PCBs content coupled with algae treatment, Toxics* 10,209, 2022.  
DOI: 10.3390/toxics10050209
111. Sanabria, E., Estesó, M. A., Edgar F. Vargas, E. F., *Recognition of Heavy Metals by Using Resorcin[4]arenes Soluble in Water, Toxics* 10, 461, 2022.  
DOI: 10.3390/toxics10080461
112. Estesó, M. A., *Advanced Studies on Toxic Chemicals: Properties and Characteristics, Toxics*, 10, 475, 2022.  
DOI: 10.3390/toxics10080475
113. Encarnação, T., Mateus, A., Gaspar, F., Santinha, D., Massano, A., Sara Biscaia, S., Guincho, P. B., Nogueira, B. A., Castro, R. E. A., Carvalho, T.A., Eusébio, M. E. S., Fausto, R., Sobral, A. J. F. N., *Bioremediation using microalgae and circular economy approach: a case study, Mater. Proc.*, 108, 8, 2022.  
DOI:10.3390/materproc2022008108
114. Costa Pereira, J.L.G.F.S., Pais, A. A.C.C., Azevedo, J. C. R., Knapik, H. G., *Methods for unsupervised contribution analysis of raw EEM data in water monitoring. Contaminant identification and quantification, Spect. Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 264, 120226, 2022.  
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.saa.2021.120226>.



115. Nunes, S.C.C. Nunes, Pais, A.A.C.C., *DNA adsorption on like-charged surfaces mediated by polycations*, *J. Mol. Liq.*, 346, 117060, 2022.  
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.117060>.
116. Basso, J.; Mendes, M.; Cova, T.; Sousa, J.; Pais, A.; Fortuna, A.; Vitorino, R.; Vitorino, C. *A Stepwise Framework for the Systematic Development of Lipid Nanoparticles*. *Biomolecules*, 12(2), 223, 2022.  
DOI: <https://doi.org/10.3390/biom12020223>.
117. Miranda, M., Veloso, C., Brown, M., Pais, A. A.C. C., Cardoso, C., Vitorino, C., *Topical bioequivalence: Experimental and regulatory considerations following formulation complexity*, *Int. J. Pharm.*, 620, 121705, 2022.  
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2022.121705>.
118. Figueiras, A., Domingues, C., Jarak, I., Santos, A.I., Parra, A., Pais, A., Alvarez-Lorenzo, C., Concheiro, A., Kabanov, A., Cabral, H., Veiga, F., *New Advances in Biomedical Application of Polymeric Micelles*, *Pharmaceutics* 14, 1700, 2022.  
DOI: <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics14081700>
119. Barata, J.F.B., Lacerda, P. S. S., Neves, M. G. P. M. S., Cavaleiro, J. A. S., Ramos, C. I. V., Tomé, A. C., Abreu, P.E., Pais, A. A. C. C., *Reaction of Corroles with Sarcosine and Paraformaldehyde: A New Facet of Corrole Chemistry*, *Int. J. Mol. Sci.* 23, 13581, 2022.  
DOI: <https://doi.org/10.3390/ijms232113581>
120. Salazar, I. L., Lourenço, A.S.T., Manadas, B., Baldeiras, I., Ferreira, C., Teixeira, A.C., Mendes, V.M., Novo, A.M., Machado, R., Batista, S., Macário, M.C., Grãos, M., Sousa, L., Saraiva, M. J., Pais, A. A. C.C., Duarte, C. B., *Posttranslational modifications of proteins are key features in the identification of CSF biomarkers of multiple sclerosis*, *Journal of Neuroinflammation*, 2022.  
DOI: <https://doi.org/10.1186/s12974-022-02404-2>
121. Veloso C., Videira A.V., Andrade P., Cardoso C., Vitorino C., *In vivo methodologies to assist preclinical development of topical fixed-dose combinations for pain management*, *International Journal of Pharmaceutics*, 2022.  
DOI: [10.1016/j.ijpharm.2022.121530](https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2022.121530)
122. Basso J., Paggi M.G., Fortuna A., Vitorino C., Vitorino R., *Deciphering specific miRNAs in brain tumors: a 5-miRNA signature in glioblastoma*, *Molecular Genetics and Genomics*, 2022.  
DOI: [10.1007/s00438-022-01866-6](https://doi.org/10.1007/s00438-022-01866-6)
123. Alves L., Ramos A., Rasteiro M.G., Vitorino C., Ferraz E., Ferreira P.J.T., Puertas M.L., Gamelas J.A.F., *Composite Films of Nanofibrillated Cellulose with Sepiolite: Effect of Preparation Strategy*, *Coatings*, 2022  
DOI: <https://doi.org/10.3390/coatings12030303>
124. Veloso C., Videira A.V., Andrade P., Cardoso C., Vitorino C., *Topical fixed-dose combinations: Current in vitro methodologies for pre-clinical development*. *International Journal of Pharmaceutics*, 2022.  
DOI: [10.1016/j.ijpharm.2022.121621](https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2022.121621)
125. Brites G., Basso J., Miranda M., Neves B.M., Vitorino C., Cruz M.T., *Development of a new hydrogel for the prevention of allergic contact dermatitis*. *International Journal of Pharmaceutics*, 2022.  
DOI: [10.1016/j.ijpharm.2022.122265](https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2022.122265)
126. Ferreira N.R., Vitorino C., Fortuna A., *From Antioxidant to Neuromodulator: The Role of Ascorbate in The Management of Major Depression Disorder*, *Biochemical Pharmacology*, 2022  
DOI: [10.1016/j.bcp.2022.115300](https://doi.org/10.1016/j.bcp.2022.115300)
127. Zuzarte M., Vitorino C., Salgueiro L., Girão H., *Plant Nanovesicles for Essential Oil Delivery*, *Pharmaceutics*, 2022  
DOI: <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics14122581>

128. Paulo, V., Pedro, S., Campos, M.G., Delgado, T., Estevinho, L., Anjos, O., *Special bioactivities of phenolics from Acacia dealbata L. with potential for dementia, diabetes and antimicrobial treatments*, *Appl. Sci.* 12(3), 1022, 2022.

DOI: <https://doi.org/10.3390/app12031022>

129. Carreira, L.D., Matias, F.C., Campos, M.G., *Clinical Data on Cannabinoids: Translational Research in the Treatment of Autism Spectrum Disorders*. *Biomedicines* 10, 796, 2022.

DOI: <https://doi.org/10.3390/biomedicines10040796>

130. Santos, M.G., Tietbohl, L., Oliveira, B., Esteves, R., Campos, M.G., Rocha, L., *Phenolic substances and cyanogenesis in galled and non-galled tissue of the fern species *Microgramma vacciniifolia**. *Brazilian Journal of Biology*, 82:1-7; e236151, 2022

DOI: 10.1590/1519-6984.236151

131. Gomes, A., Camara, C., Sousa, A., Santos, F., Campos, M.G., Silva, T., *Chemical composition and free radical-scavenging activities of monofloral bee pollen from *Mimosa pudica L.**, *Journal of Apicultural Research*, 2022

DOI: 10.1080/00218839.2022.2056290

132. Abbasi, M., Santos, B.P., Pereira, T.C., Sofia, R., Monteiro, N.R.C., Simões, C.J.V., Brito, R.M.M., Ribeiro, B., Oliveira, J.L., Arrais, J.P. *Designing optimized drug candidates with Generative Adversarial Network*, *J. Cheminform.*, 14, 40, 2022.

DOI: 10.1186/s13321-022-00623-6

133. Almeida, Z.L., Brito, R.M.M., *Amyloid Disassembly: What Can We Learn from Chaperones?*, *Biomedicines*, 10, 3276, 2022.

DOI:10.3390/biomedicines10123276

134. Bornes, C., Stosic, D., Geraldes, C.F.G.C., Mintova, S., Rocha, J., Mafra, L., *Elucidating the nature of the external acid sites of ZSM-5 zeolites using NMR probe molecules*, *Chem.Eur. J.* 28, e202201795(1of 6), 2022.

DOI: 10.1002/chem.202201795

135. Botta, M., Geraldes, C.F.G.C., Tei, L., *High Spin Fe(III)-Doped Nanostructures as T<sub>1</sub> MR Imaging Probes*, *WIREs Nanomedicine and Biotechnology*, e1858, 2022.

DOI: 10.1002/wnan.1858

136. Conde-Giménez, M., Galano-Frutos, J.J., Galiana-Cameo, M., Mahía, A., Victor, B.L., Salillas, S., Velázquez-Campoy, A., Brito, R.M.M., Gálvez, J.A., Díaz-de-Villegas, M.D., Sancho, J., *Alchemical Design of Pharmacological Chaperones with Higher Affinity for Phenylalanine Hydroxylase*, *Int. J. Mol. Sci.*, 23, 4502, 2022.

DOI: 10.3390/ijms23094502.

137. Cordeiro, M. M.; Salvador, A.; Moreno, M. J. *Calculation of Permeability Coefficients from Solute Equilibration Dynamics: An Assessment of Various Methods*, *Membranes*, 12, pp 254, 2022.

DOI:10.3390/membranes12030254

138. Ferreira, A.G.M., Santos, J.B., Jalkh, J., Khalighi, S., Cruz, P.F., Brito, R.M.M., *Pressure Effect on the Speed of Sound of Waste Cooking Oil Biodiesel*, *J. Chem. Eng. Data*, 67, pp 3046–3058, 2022.

DOI: 10.1021/acs.jced.2c00473

139. Ferreira, E., Almeida, Z.L., Cruz, P.F., Sousa, M., Verissimo, P., Brito, R.M.M., *Searching for the Best Transthyretin Aggregation Protocol to Study Amyloid Fibril Disruption*, *Int. J. Mol. Sci.*, 23, 391, 2022.

DOI: 10.3390/ijms23010391.

140. Filipe, H. A. L., Loura, L. M. S., *Molecular Dynamics Simulations: Advances and Applications*, *Molecules*, 27, 2105, 2022.

DOI:10.3390/molecules27072105

141. Geraldes, C.F.G.C., Castro, M.M.C. A., Peters, J.A., *Response to Letter to the Editors: “Have we lost an essential link between coordination chemistry and medical applications?”*, *Coord. Chem. Rev.*, 461, 214494, 2022

DOI: 10.1016/j.ccr.2022.2144

142. Geraldes, C.F.G.C., Peters, J.A., *MRI Contrast Agents in Glycobiology*, *Molecules*, 27, 8297, 2022.  
DOI: 10.3390/molecules27238297
143. Ledo, A.; Fernandes, E.; Salvador, A.; Laranjinha, J.; Barbosa, R. M. *In vivo hydrogen peroxide diffusivity in brain tissue supports volume signaling activity*. *Redox Biology*, 50, 102250, 2022.  
DOI:10.1016/j.redox.2022.102250
144. Lee, H. Y.; Ithnin, A.; Azma, R. Z.; Othman, A.; Salvador, A.; & Cheah, F. C. *Glucose-6-Phosphate Dehydrogenase Deficiency and Neonatal Hyperbilirubinemia: Insights on Pathophysiology, Diagnosis, and Gene Variants in Disease Heterogeneity*. *Frontiers in Pediatrics*, 10, 875877, 2022.  
DOI: 10.3389/fped.2022.875877
145. Librando, I. L., Mahmoud, A. G., Carabineiro, S.A.C., Guedes da Silva, M.F.C., Maldonado-Hódar, F.J., Geraldes, C.F.G.C., Pombeiro, A.J.L., *Heterogeneous gold nanoparticle-based catalysts for the synthesis of click-derived triazoles via the azide-alkyne cycloaddition reaction*, *Catalysts*, 12, 45, 2022.  
DOI: 10.3390/catal12010045
146. Luís, J.P., Mata, A.I., Simões, C.J.V., Brito, R.M.M., *Conformational Dynamics of the Soluble and Membrane-Bound Forms of Interleukin-1 Receptor Type-1: Insights into Linker Flexibility and Domain Orientation*, *Int. J. Mol. Sci.*, 23, 2599, 2022.  
DOI:10.3390/ijms23052599
147. Luís, J.P., Simões, C.J.V., Brito, R.M.M., *The Therapeutic Prospects of Targeting IL-1RI for the Modulation of Neuroinflammation in Central Nervous System Disorders*, *Int. J. Mol. Sci.* 23, 1731, 2022.  
DOI:10.3390/ijms23031731
148. Magalhaes, N.; Simões, G. M.; Ramos, C.; Samelo, J.; Oliveira, A. C.; Filipe, H. A. L.; Ramalho, J. P. P.; Moreno, M. J.; Loura, L. M. S. *Interactions between Rhodamine Dyes and Model Membrane Systems—Insights from Molecular Dynamics Simulations*, *Molecules*, 27, 1420, 2022.  
DOI:10.3390/molecules27041420
149. Rosário-Ferreira, N.; Bonvin, A. M. J. J.; Moreira, I. S., *Using machine-learning-driven approaches to boost hot-spot's knowledge*, *WIREs Computational Molecular Science*, 2022  
DOI: 10.1002/wcms.1602
150. Moreno, M. J.; Loura, L. M. S.; Martins, J.; Salvador, A.; Velazquez-Campoy, A. *Analysis of the Equilibrium Distribution of Ligands in Heterogeneous Media - Approaches and Pitfalls*, *International Journal of Molecular Sciences*, 23, 9757, 2022.  
DOI:10.3390/ijms23179757
151. Morfin, J.-F., Lacerda, S., Geraldes, C.F.G.C., Tóth, É., *Metal complexes for the visualisation of amyloid peptides*, *Sensors & Diagnostics*, 1, pp 627–647, 2022.  
DOI: 10.1039/D2SD00026A
152. Oliveira, A. C.; Filipe, H. A. L.; Ramalho, J. P. P.; Salvador, A.; Geraldes, C. F. G. C.; Moreno, M. J.; Loura, L. M. S. *Modeling Gd<sup>3+</sup> Complexes for Molecular Dynamics Simulations: Toward a Rational Optimization of MRI Contrast Agents*, *Inorganic Chemistry*, 61, pp 11837-11858, 2022.  
DOI:10.1021/acs.inorgchem.2c01597
153. Pires, C. L.; Silva, I. M. V.; Coimbra, M. A.; Moreno, M. J.; Coreta-Gomes, F. *Effect of Coffee on the Bioavailability of Sterols*, *Foods*, 11, 2935, 2022, DOI:10.3390/foods11192935
154. Primitivo, M. J.; Neves, M.; Pires, C. L.; Cruz, P. F.; Brito, C.; Rodrigues, A. C.; de Carvalho, C. C. C. R.; Mortimer, M. M.; Moreno, M. J.; Brito, R. M. M.; Taylor, E. J.; Millson, S. H.; Reboredo, F.; Jorge Campos, M.; Vaz, D. C.; Ribeiro, V. S. *Edible flowers of Helichrysum italicum: Composition, nutritive value, and bioactivities*, *Food Research International*, 157, 111399, 2022.  
DOI:https://doi.org/10.1016/j.foodres.2022.111399

155. Ramos, C. V.; Samelo, J.; Martins, P. A. T.; Moreno, M. J. *Protein Quantification in Complex Matrices*, *J. Chem. Educ.*, 99, pp 1488-1496, 2022.  
DOI: 10.1021/acs.jchemed.2c00109
156. Sousa, T.; Gouveia, M.; Travasso, R. D. M.; Salvador, A. *How abundant are superoxide and hydrogen peroxide in the vasculature lumen, how far can they reach?* *Redox Biology*, 102527, 2022.  
DOI: 10.1016/j.redox.2022.102527
157. Trigueiro-Louro, J., Santos, L.A., Almeida, F., Correia, V., Brito, R.M.M., Rebelo-de-Andrade, H., *NS1 protein as a novel anti-influenza target: Map-and-mutate antiviral rationale reveals new putative druggable hot spots with an important role on viral replication*, *Virology*, 565, pp 106-116, 2022.  
DOI: 10.1016/j.virol.2021.11.001
158. Bueschbell, B; Caniceiro, A. B.; Suzano, P.M.S.; Machuqueiro, M.; Rosário-Ferreira, N.; Moreira, I. S., *Network biology and artificial intelligence drive the understanding of the multidrug resistance phenotype in cancer*. *Drug Resistance Updates* 60, 2022  
DOI: 10.1016/j.drug.2022.100811
159. Marques-Pereira, C.; Pires, M. N.; Gouveia, R. P.; Pereira, N. N.; Caniceiro, A. B.; Rosário-Ferreira, N.; Moreira, I.S., *SARS-CoV-2 Membrane Protein: From Genomic Data to Structural New Insights*, *International Journal of Molecular Sciences*, 23 6, 2022  
DOI: 10.3390/ijms23062986
160. Sérgio P. J. Rodrigues. *Química e Saúde Pública: Elementos da História de uma relação fundamental*. *Revista Multidisciplinar* 2022  
DOI: <https://doi.org/10.23882/rmd.22087>
161. Sérgio P. J. Rodrigues; Pedro J. B. Caridade. *Contributos para a história da química computacional e do uso dos computadores em química*. *História da Ciência e Ensino: construindo interfaces*, 25, 2022, 140-153.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.23925/2178-2911.2022v25esp140-153>
162. Paulo Roberto Vilarim, Décio R. Martins, Sérgio P. J. Rodrigues. *Trajatória e meandros da Educação Escolar Indígena em países colonizados por Espanha*. *ODEERE* 7(3)m 2022, 140-166.  
DOI: <https://doi.org/10.22481/odeere.v7i3.11223>
163. Paulo Roberto Vilarim, Décio R. Martins, Sérgio P. J. Rodrigues. *A formação acadêmica como alternativa na divulgação e preservação do etnoconhecimento Terena*. *#Tear Revista de Educação Ciência e Tecnologia* 11(2), 2022.  
DOI: <https://doi.org/10.35819/tear.v11.n2.a6201>
164. Paulo Roberto Vilarim, Sérgio P. J. Rodrigues, Décio R. Martins. *Material didático como ferramenta na transmissão do conhecimento tradicional para os professores Terena*. *Intermeio* 28(55), 2022, 194-213.  
DOI: <https://doi.org/10.55028/intermeio.v28i55.17296>
165. Paulo Roberto Vilarim, Décio R. Martins, Sérgio P. J. Rodrigues. *Caminhos da Educação Escolar Indígena entre países colonizados pela Inglaterra e suas diferenças*. *ODEERE* 7(2), 2022, 114-135.  
DOI: <https://doi.org/10.22481/odeere.v7i2.10860>
166. Vanessa Fonseca, Sérgio P. J. Rodrigues, Maurício Pazinato. *Os currículos dos primeiros cursos de química da universidade de Coimbra e de universidades brasileiras*. *Química Nova*, 2022, no prelo.  
DOI: <https://doi.org/10.21577/0100-4042.20170956>
167. Viegas, L. P., *Theoretical Chemistry of Atmospheric Processes*, *Atmosphere*, 13, pp 309, 2022. Editorial.  
DOI: 10.3390/atmos13020309
168. Viegas, L. P., *Gas-phase OH-oxidation of 2-Butanethiol: Multiconformer Transition State Theory Rate Constant with Constrained Transition State Randomization*, *Chem. Phys. Lett.*, 803, pp 139289, 2022.  
DOI: 10.1016/j.cplett.2022.139829

169. Viegas, L. P., *Atmospheric Degradation of Two Hydrofluoroketones: Theoretical Rate Constants for the Gas-Phase OH-Oxidation of HFK-447mcc and HFK-465mc*, *Atmosphere*, 13, pp 309, 2022.  
DOI: 10.3390/atmos13081256
170. Viegas, L. P., *Multiconformer Transition State Theory Rate Constant and Branching Ratios for the OH-Initiated Reaction of CH<sub>3</sub>OCF<sub>2</sub>CHF<sub>2</sub> and its Primary Product, HC(O)OCF<sub>2</sub>CHF<sub>2</sub>*, *J. Phys. Org. Chem.*, 2022.  
DOI: 10.1002/poc.4470
171. Varandas, A. J. C., *From six to eight P-electron bare rings of group-XIV elements and beyond: can planarity be deciphered from the “quasi-molecules” they embed?*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 4, 8488-8507, 2022.  
DOI: 10.1039/d1cp04130d}
172. Mota, V. C., Caridade, P. J. S. B., Varandas, A. J. C. and Galvão, B. R. L., *A quasiclassical-trajectory study of the Si+SH reaction on an accurate DMBE potential energy surface*, *J. Phys. Chem. A*, 126, 3555-3568, 2022.  
DOI: 10.1021/acs.jpca.2c01633
173. Pansini, F.N.N., Varandas, A.J.C., *On the continuous solvation model and infrared spectroscopy of liquid water*, *Chem. Phys. Lett.*, 801, 139739, 2022.  
DOI: 10.1016/j.cplett.2022.139739
174. Rocha, C. M. R., Linnartz, H., Varandas, A. J. C, *Reconciling spectroscopy with dynamics in global potential energy surfaces: the case of the astrophysically relevant SiC<sub>2</sub>*, *J. Chem. Phys.* 157, 104301 2022.
175. Varandas, A. J. C., *Can the quasi-molecule concept help in deciphering planarity? The case of polycyclic aromatic hydrocarbons*, *Int. J. Quantum Chem.* (in press).  
DOI: 10.1002/qua.27036
176. Varandas, A. J. C., *Scale-free-modeling (harmonic) vibrational frequencies: Assessing accuracy and cost-effectiveness by CBS extrapolation*, *J. Chem. Phys.* 57, 174110 (2022).  
DOI: 10.1063/5.0122268
177. Gregorio, J., Gouveia-Caridade, C. and Caridade, P. J. S. B., *Modeling PM<sub>2.5</sub> and PM<sub>10</sub> Using a Robust Simplified Linear Regression Machine Learning Algorithm*, 13, 1334 (2022).  
DOI: 10.3390/atmos13081334
178. Hipólito, N., Martins, S., Ruivo, A., Flora, S., Silva, C.G., Marques, A., Brooks, D., Cruz, J. (2022). *Construct validity and reliability of the Informal Caregiver Burden Assessment Questionnaire (QASCI) in caregivers of patients with COPD*. *Respiratory Medicine* 205: 107027.  
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.rmed.2022.107027> - Indexado em: Scopus
179. Rama, N., Lages, M., Silva, C.G., Motta Lima, P., Gil, I.C., Guarino, M.P., Oliveira, P., Dixe, M., Rocha, A., Castro-Poças, F., Pimentel, J. (2022). *The Usefulness of Inflammatory Biomarkers to Predict Anastomotic Leakage after Colorectal Surgery: Systematic Review and Meta-Analysis*. *Surg. Gastroenterol. Oncol.*, 27(3): 169-181.  
DOI: <https://doi.org/10.21614/sgo-488> - Indexado em: Scopus
180. Rama, N., Lages, M., Guarino, M.P., Lourenço, O., Motta Lima, P., Parente, D., Silva, C.G., Castro, R., Bento, A., Rocha, A., Castro-Poças, F., Pimentel, J. (2022) *Usefulness of serum C-reactive protein and calprotectin for the early detection of colorectal anastomotic leakage: A prospective observational study*. *World J Gastroenterol* 2022, 28(24): 2758-2774.  
DOI: <https://doi.org/10.3748/wjg.v28.i24.2758> - Indexado em: Scopus; Web of Science
181. Machado, P., Morgado, M., Raposo, J., Mendes, M., Silva, C.G., Morais, N. (2022). *Effectiveness of exercise training on cancer-related fatigue in colorectal cancer survivors: a systematic review and meta-analysis of randomized controlled trials*. *Support Care Cancer*, 30: 5601–5613.  
DOI: <https://doi.org/10.1007/s00520-022-06856-3> - Indexado em: Scopus; Web of Science

## Articles in National Peer-Reviewed Journals (8)

1. L. C. Gomes-da-Silva, F. A. Schaberle, L. G. Arnaut., *Terapia fotodinâmica: luz, oxigénio e reação!* In *TecnoHospital*, 110, pp. 28-30, 2022.

2. Marques, C. M., Burke, A. J., *Isatina: “Bloco de Construção” Promissor no Desenvolvimento de Novos Fármacos*, *Química, Boletim da Sociedade Portuguesa de Química*, 46, pp 247-257, 2022.

DOI: 10.52590/M3.P704

3. Alves, C., Pina J., Pineiro, M., Cardoso, A. L., *A química escondida nos alimentos*, *Química, Boletim da Sociedade Portuguesa de Química*, 45, 165, pp 133-138, 2022.

DOI: 10.52590/M3.P702.A30002547

4. Isabel Marília Peres; Sérgio P. J. Rodrigues. *O Apelo do Liberalismo e do Romantismo na Ciência e na Política Portuguesa do Século XIX: Contribuições do Visconde de Vilarinho de São Romão e do Visconde de Vila Maior*. *RomanThis* 1(1), 2022, 184-201.

5. Sérgio P. J. Rodrigues. *Recensão Crítica de “Química ao Pé da Letra” (2021) de João Carlos Paiva, Carla Morais, Martinho Soares, José Araújo, Hugo Vieira e Luciano Moreira*. *APeDuC Journal* 3 (1), 2022, 136-137. <https://apeducrevista.utad.pt/index.php/apeduc/article/view/265/118>.

6. Sérgio P. J. Rodrigues, Marta Piñeiro. *Lápis e Borracha*. *Bol. SPQ (Química)* 46(164) 2022, 74.

DOI: <http://dx.doi.org/10.52590/M3.P701.A30002516>

7. Viegas, L. P., *Teoria do Estado de Transição ao Serviço da Química Verde*, *Química, Boletim da Sociedade Portuguesa de Química*, 167, pp 258-265, 2022.

DOI: 10.52590/M3.P704.A30002604

8. Varandas, A. J. C., *Ab initio potentials: From CBS extrapolation to globalness to riddles in the chemistry of small carbon clusters*, *Memories of the Class of Sciences, Academia das Ciências de Lisboa*, (in press).

## Communications at International Meetings (130)

### International Keynotes / Plenary / Invited Lectures (30)

1. Fausto, R., *IR-Induced and Tunneling-Driven Reactions in Cryogenic Matrices: “Plastic Molecular Cryosurgery”*, XXVII RNE - XI CIE, Málaga, Espanha, 2022. **Plenary Lecture**
2. Fausto, R., *IR-Induced and Tunneling Reactions in Cryogenic Matrices: The (Incomplete) Story of a Successful Endeavor*, EuChemS IUPAC 2022, Lisboa, Portugal, 2022. **Plenary Lecture**
3. Nunes, C. M., *Chemistry Triggered by Infrared Vibrational Excitation in Cryogenic Matrices*, CPLT - Chemistry and Physics at Low Temperatures, Visegrad, Hungria, 2022. **Plenary Lecture**
4. Fausto, R., Nunes, C. M., *IR-Induced and Tunneling-Driven Reactions in Cryomatrices*, 16th International Conference on Molecular Spectroscopy, Szczawnica, Polónia, 2022. **Plenary Lecture**
5. Luis G. Arnaut, L. L. Santos, *Redaporfin: Clinical validation of a new approach to head and neck cancer*. 4<sup>th</sup> Photodynamic Therapy and Photodiagnosis Update Symposium, Nancy (França), 24-28/10/2022. **Invited Lecture**
6. Luis G. Arnaut, L. C. Gomes-da-Silva, C. Donohoe, *Unravelling the pivotal role of atropisomerism for cellular internalization and for the efficacy of photodynamic therapy*, 2022 Biennial Meeting of the American Society for Photobiology, Albuquerque (USA), 25-28/09/2022. **Invited Lecture**
7. Luis G. Arnaut, C. Donohoe, F. A. Schaberle, F. M. S. Rodrigues, M. M. Pereira, M. O. Senge, L. C. Gomes-da-Silva, *Atropisomerism of porphyrin derivatives uncovers molecular motifs that promote cell uptake*, 12<sup>th</sup> International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines, Madrid (Espanha), 10-15/07/2022. **Invited Lecture**
8. Luis G. Arnaut, *Theranostics with photoacoustic tomography and photosensitizers*, LaserLab Europe Talks, online de Berlin (Alemanha), 23/02/2022. **Invited Lecture**
9. C. Serpa, *Finding Materials for Efficient Laser Ultrasound Generation*, XX BMIC, Brazilian Meeting on Inorganic Chemistry, Bento Gonçalves (RS, Brazil), 12-16/9/2022. **Invited Lecture**
10. L. C. Gomes-da-Silva, C. Donohoe, Luis G. Arnaut, *The impact of Atropisomerism on Photodynamic therapy*. VII Jornadas Ibéricas de Fotoquímica, Alcalá de Henares, Spain, 5-8/09/2022. **Invited Lecture**
11. Pereira, M. M., *Catalyst Fine Tuning for Sequential Processes - A Path for Sustainability*, XXII International Symposium on Homogeneous Catalysis (XXII ISHC), Lisboa, Portugal, 2022. **Plenary Lecture**
12. Pereira, M. M.; Rodrigues, F. M. S., *Sustainable approaches for continuous flow catalytic processes*, 8<sup>th</sup> Latin American Symposium on Coordination and Organometallic Chemistry, online, 2022. **Invited Oral presentation**
13. Burke A.J., *Harnessing the Power and Versatility of Catalytic Multicomponent Reactions*, XXII International Symposium on Homogeneous Catalysis (XXII ISHC), Lisboa, Portugal, 2022. **Plenary Lecture**
14. Brandão, P., *Catalysis and Multicomponent reactions - a perfect match in the quest for new bioactive compounds*, P. Brandão. 28th Ibero-American Catalysis Congress (CICAT), Universidade Federal do Rio Grande do Norte (UFRN), Brasil, 2022 (evento virtual). **Keynote Lecture**
15. Utzeri, G., Cova, T. F., Murtinho, D., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M., *Cyclodextrin nanosponges as efficient matrices for pesticide removal*, 8th International Conference on Bio-based and Biodegradable Polymers (Biopol-2022), Alicante, Spain, 2022. **Keynote Lecture**
16. Pais, A., *Molecular simulation and the behavior of polyelectrolytes in solution and at interfaces*. IX Iberian Meeting on Colloids and Interfaces - RIC19, Spain, 2022. **Invited Oral Presentation**

17. Campos, M.G., Lokutova, O., Anjos, A., *Therapeutic Potential of Pollen*. IcBees. 16-18 June. Turkey, 2022. **Plenary Lecture**.
18. Anjos, A., Hongliang, L., Campos, M.G., *Bee pollen as a healthy food and food ingrediente* – IcBees, 16-18 June, Turkey, 2022. **Keynote lecture**
19. Campos, M.G., *Drug-Herb Interactions as a cause of therapeutic failure or toxic events: Oncology examples of Case Reports*. I-EuSPMF Conference, 7-9 September, Belgrade- SERBIA, 2022. **Plenary Lecture**
20. Geraldés, C. F. G. C., *Paramagnetic lanthanide and transition metal complexes as in vivo MRI biological reporters*, Department of Chemistry, University of Basel, Switzerland, June 17, 2022. **Plenary Lecture**
21. Carlos F.G.C. Geraldés, *Paramagnetic lanthanide and transition metal complexes as in vivo MRI biological reporters*, Werner Siemens Imaging Center, Department of Preclinical Imaging and Radiopharmacy, University Hospital Tübingen, University of Tübingen, Germany, June 21, 2022. **Plenary Lecture**
22. Ledo, A., Fernandes, E., Salvador, A., Laranjinha, J., Barbosa, R.M., *In vivo hydrogen peroxide diffusivity in brain tissue supports volume signaling activity*, The future of Redox Biology, Siena, Italy, 2022, **Invited Oral Presentation**
23. Sousa, T., Fernandes, E., Gouveia, M., Laranjinha, J., Barbosa, R., Ledo, A., Travasso, R., Salvador, A. *How far does hydrogen peroxide travel in the microcirculation and in tissues?* The Biochemistry Global Summit: IUBMB-FEBS-PAMB 2022 Congress, Lisbon, Portugal, 2022, **Invited Oral Presentation**
24. Caridade, P. J. S. B., “Data analytic from a single-click platform - I”, Workshop on data visualization (online event, janeiro 20, 2022). **Invited Lecture**
25. Caridade, P. J. S. B., “Data analytic from a single-click platform - II”, Workshop on data visualization for Living Labs (online event, junho 10, 2022). **Invited Lecture and Demonstration**
26. Varandas, A. J. C., “Quest for shape, energetics and reaction dynamics: Toward “green Computing”, XI IMPRA (Havana, Cuba, Nov. 7-11, 2022). **Plenary Lecture**
27. Varandas, A. J. C., “From Molecular Shapes to Reaction Dynamics”, XIV QRS (Balatonfoldvar, Hungary, Sep. 4-9, 2002). **Plenary Lecture**
28. Varandas, A. J. C., “Molecular Shapes, Potentials, Reaction dynamics (Toward Astrochemistry without Equations)” (Domingos Martins, Brazil, Dec. 13, 2022). **Plenary Lecture**
29. Varandas, A. J. C., “New Answers to Old Challenges in Ab Initio Quantum Chemistry”, Universidad de La Habana (Habana, Cuba, Feb 10, 2022). **Plenary Lecture**
30. Luis G. Arnaut, C. S. Lobo, M. I. P. Mendes, D. A. Pereira, *Photoacoustic delivery and imaging methods in PDT*, SPIE Photonics West, São Francisco (USA), 22-27/01/2022. **Invited Lecture**



## International Oral Presentations (40)

1. Silva, J. F. C., Rosado, M. T. S., Pereira, P. S., Ramos Silva, M., Fantechi, E., Chelazzi, L., Ciattini, S., Eusébio, M. E. S., *Intermolecular association in co-amorphous systems and their relaxation to co-crystals*, Multis2022 — Multiscale Phenomena in Condensed Matter, Kraków, Poland, online, 2022. **Oral Presentation**
2. Baptista, J. A., Rosado, M. T. S., Castro, R. A. E., Canotilho, J., Fantechi, E., Chelazzi, L., Ciattini, S., Eusébio, M. E. S., *ProbucoI – solvent effects on polymorph crystallization*, XXVI Encontro Galego Português de Química, Santiago de Compostela, Spain, 2022. **Oral Presentation**
3. Piccirillo, G., Aroso, R. T., Baptista, J. A., Canotilho, J., Castro, R. A. E., Da Silva, G. J., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., Eusébio, M. E. S., *Active Pharmaceutical Ingredient's multicomponent solid forms: a contribution to enhance the trimethoprim biopharmaceutical performance*, XXVI Encontro Galego Português de Química, Santiago de Compostela, Spain, 2022. **Oral Presentation**
4. Roque, J. P. L., Nunes, C. M., Viegas, L. P., Doddipatla, S., Wood, S. A., McMahon, R. J., Fausto, R., *Unprecedented Quantum Tunneling Reactions from the Chemistry of 2-Formylphenylnitrenes*, CPLT - Chemistry and Physics at Low Temperatures, Visegrad, Hungria, 2022. **Oral Presentation**
5. Brás, E. M., Zimmermann, C., Fischer, T. L., Suhm, M. A., Fausto, R., *Jet-cooled and Matrix-Isolated Radicals: Monitoring Interactions and Reactions through IR Spectroscopy*, CPLT - Chemistry and Physics at Low Temperatures, Visegrad, Hungria, 2022. **Oral Presentation**
6. Nogueira, B. A., Milani, A., Cardoso, R., Paixão, J. A., Castiglioni, C., Fausto, R., *Theoretical Design, Synthesis and Characterization of Novel Thermochromic Materials*, XXVIII International Conference on Raman Spectroscopy (ICORS), Long Beach, California, USA, 2022. **Oral Presentation**
7. C. Serpa, D.A. Pereira, T. Pinto, A.D. Silva, M.J. Moreno, L.G. Arnaut, *Broadband High-frequency Laser Ultrasound Generation and Applications Towards Biological Membranes*, 21st International Conference on Photoacoustic and Photothermal Phenomena, Bled (Slovenia), 19-24/6/2022. **Oral Presentation**
8. C. Serpa, *Enhancing Skin Permeation and effect of Cosmeceuticals with Photoacoustic Waves / Mejora de la Penetración en la Piel y Efecto de los Cosmécuticos con Ondas Fotoacústicas*, XXVIIIas Jornadas Mediterraneas de Confrontaciones Terapeuticas en Medicina y Cirurgia Cosmetica, Barcelona (Spain) 13-14/5/2022. **Oral Presentation**
9. C. Serpa, D.A. Pereira, T. Pinto, A.D. Silva, L.G. Arnaut, *Generation and Applications of Broadband High-frequency Laser Ultrasound Based on Nanostructured Materials*, SPIE Photonics West, San Francisco (USA), 22-27/1/2022. **Oral Presentation**
10. C.P. João, S. M.-Guímaro, R. Cardoso, J. Santos, D.A. Pereira, L.G. Arnaut, C. Serpa, *Generation of high-frequency photoacoustic pulses to enhance skin permeation of active molecules*, AOP2022, 5th International Conference on Application of Optics and Photonics, Guimarães (Portugal), 18-22/7/2022. **Oral Presentation**
11. M. I. P. Mendes, F. A. Schaberle, M. J. F. Calvete, M. M. Pereira, L. G. Arnaut, *Nanodroplets loaded with Tetrapyrrolic Dyes for Photoacoustic Tomography*, 21<sup>st</sup> International Conference on Photoacoustic and Photothermal Phenomena, Bled, Slovenia, 20/6/2022. **Oral Presentation**
12. Diogo A. Pereira, Catarina S. Lobo, Maria Inês P. Mendes, Luis G. Arnaut, *Photoacoustic Delivery of photosensitizers for Photodynamic Therapy*, 21<sup>st</sup> International Conference on Photoacoustic and Photothermal Phenomena, Bled, Slovenia, 20/6/2022. **Oral Presentation**
13. Carrilho, R. M. B., Felgueiras, A. P., Rodrigues, F. M. S. Pereira, M. M. *Transition Metal Complexes of tris-BINOL Bulky Phosphites as Homogeneous Catalysts for Synthetic Processes*, XXII International Symposium on Homogeneous Catalysis (XXII ISHC), Lisboa, Portugal, 2022. **Oral Presentation**

14. Piccirillo, G., Maldonado-Carmona, N., Marques, D. L., Villandier, N., Leroy-Lhez, S., Eusébio, M. E. S., Tomé, J. P. C., Pereira, M. M., Calvete, M. J. F., *The antibiotics challenge: sustainable catalytic strategies for trimethoprim oxidation*, XXII International Symposium on Homogeneous Catalysis (XXII ISHC), Lisboa, Portugal, 2022. **Oral Presentation**
15. Aroso, R. T., Silva, M. F. C., Domingos, C. V., Dabrowski, J. M., Pucelik, B., Barzowska, A., Silva, G. J., Carrilho, R. M. B., Arnaut, L. G., Pereira, M. M., *Cationic imidazolyl porphyrins bearing amphiphilic side chains combined with antimicrobials: new strategies to potentiate E. coli photodynamic inactivation*, XXVI Encontro Galego-Português de Química, Santiago de Compostela, Espanha, 2022. **Oral Presentation**
16. Teixeira, D. S. S., Pinto, S. M. A., Aroso, R. T., Pereira, M. M., *Fluorinated contrast agents for application in <sup>19</sup>F MRI and PET*, XXVI Encontro Galego-Português de Química, Santiago de Compostela, Espanha, 2022. **Oral Presentation**
17. Arnaut, Z. A., Aroso, R. T., Pinto, S. M. A., Lobo, A. C. S., Amorin, A. S., Calvete, M. J. F., Rodrigues-Santos, P., Pereira, D., Almeida, L. P., Arnaut, L. G., Pereira, M. M., *Synthesis of di-imidazolyl porphyrins and their chlorin derivatives for photoinactivation of bacteria and viruses*, XXVI Encontro Galego-Português de Química, Santiago de Compostela, Espanha, 2022. **Oral Presentation**
18. Felgueiras, A. P., Rodrigues, F. M. S., Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M., *Hydroformylation-based reactions using chiral binaphthyl monophosphite ligands*, XXVI Encontro Galego-Português de Química, Santiago de Compostela, Espanha, 2022. **Oral Presentation**
19. Masliy, V., Silva, M. F. C., Rodrigues, F. M. S., Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M., *Sustainable synthetic catalytic processes for transformation of eugenol into potential fragrances*, XXVI Encontro Galego-Português de Química, Santiago de Compostela, Espanha, 2022. **Oral Presentation**
20. Utzeri, G., Cova, T. F., Murtinho, D., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M., *Confidor removal study: assessment of macro- and microscopic interactions*, IX Iberian Meeting on Colloids and Interfaces (RICI IX), Santiago de Compostela, Spain, 2022. **Oral Presentation**
21. Vareda, J. P., Braga-Gomes, M., Murtinho, D., Valente, A. J. M., Durães, L., *Chitosan modified silica aerogels for the adsorption of pollutants*, JUNIOR EUROMAT, Coimbra, Portugal, 2022. **Oral Presentation**
22. Utzeri, G., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Amine-cyclodextrin-based nanosponges – novel polymeric sorbent materials*, JUNIOR EUROMAT, Coimbra, Portugal, 2022. **Oral Presentation**
23. Simões, J. C. S., Pereira, B., Veiga, D., Duarte, S. F., Lopes, S. M. M., Rodrigues, A. C. B., Seixas de Melo, S. J., Piñeiro, M., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Melo Enhancing photophysical properties of BODIPYs through oxime and hydrazone functionalization: novel imaging agents*, XXVI Encontro Galego-Português de Química, Santiago de Compostela, Espanha, 2022. **Oral Presentation**
24. Valente, A. J. M., Guirado-Moreno, J. C., Guembe-García, M., García, J. M., Aguado, R., Vallejos, S., *A visually responsive paper for anticounterfeiting application*, IX Iberian Meeting on Colloids and Interfaces - RICI9, Santiago de Compostela, Spain, 2022. **Oral Presentation**
25. Estesó, M. A., Investigación: Uno de los pilares sobre los que se asienta la universidad. ACTO: Semana de la Investigación, Universidad de América, Bogotá, Colombia, 2022. **Oral Presentation**
26. Ribeiro, A. C. F., *Chemistry of Aqueous Solutions and its Impact on Pharmaceutical Medicinal and Ambiental Areas*, Seminário no Departamento de Química da Universidade de Alcalá de Henares, Madrid, Espanha, 2022. **Oral Presentation**
27. A.C.F. Ribeiro, A. C. F., *I Jornada Ibérica de Química Farmacológica Avanzada, Seminários na Universidade Católica de Ávila, Ávila, Espanha, 2022. Oral Presentation*

28. Paiva, I., Cunha, L., Sofio, S., A. Ribeiro, A., *Understanding karst massif physical characteristics from the analysis of springs natural responses: a combined methodological approach*), 10th International Conference on Geomorphology, Coimbra, 2022. **Oral Presentation**  
DOI:10.5194/icg2022-372
29. Galindres, D. M., Vargas, E. F., Ribeiro, A. C. F., Estes, M. A., *Interacción de resorcin[4]arenos sulfonados con Albúmina de Suero bovino*), V Congreso Colombiano de Electroquímica, VIII Seminario Internacional de Química Aplicada, III Escuela Andino-amazónica de Química, Workshop Química y Biología de Hongos con potencial Biotecnológico, Universidad de Amazonia, Florencia, Caquetá, Colombia, 2022. **Oral Presentation**
30. Rodrigues, A. C. B., Peixoto, M., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *AIE-luminogens as promising structures for increasing solar photovoltaics efficiency*. VII Jornadas Ibéricas de Fotoquímica, Alcalá de Henares, Espanha, 2022. **Oral Presentation**
31. Mendes, M., António, M., Silva, A. L., Ramos, M. L., Sereno, I., Oliveira, R., Gomes, C., Castelo-Branco, M., Sousa, J., Pais, A., Vitorino, C., *Hybrid nanoparticles as a multifunctional platform for brain tumor*, COST NANO2CLINIC, apresentação on-line, 2022. **Oral Presentation**
32. Encarnação, T., Ramos, P., Mateus, A., Gaspar, F., Massano, A., Biscaia, S., Guincho, P. B., Costa, A. M., Nogueira, B. A., Carvalho, T. A., Fausto, R., Sobral, A. J. F. N., *Microalgae for Industrial Wastewater treatment*, CHEMEET 2022 - International Chemistry Conference. Virtual Conference organizada pelo CDRSP – Centro para o Desenvolvimento Rápido e Sustentado de Produto do Politécnico de Leiria, 2022. **Oral Presentation.**
33. Basso, J., Mendes M., Sereno J., Cova T., Nunes S., Fortuna A., Castelo-Branco M., Falcão A., Sousa J., Pais A., Vitorino C. *Surface Matters: Targeted delivery with ultra-small lipid nanoparticles for glioblastoma treatment*. GLADE HD Conference on "Bio-health, brain-ageing and digital health – Poitiers, France, 2022. **Oral Presentation**
34. Vilas-Boas, M., Anjos, O., Campos, M.G., Russo-Almeida, P., Falcão, S., *Establishing Standards to Strengthen the International Trade of Bee Products*. IcBees. 16-18 June, Turkey, 2022. **Oral Presentation**
35. Chiaffarelli, R., Jurek, P., Cruz, P., Geraldes, C.F.G.C., Kiefer, G., Martins, A.F., *Extracellular Lactate Imaging with a New Generation of Lanthanide-based Shift Reagents and CEST MRI*, The Future of Molecular Magnetic Resonance, California Institute of Technology, Pasadena, California, USA, 2022. **Oral Presentation**
36. Coelho, C., *Protein hydrogel as a practical approach for the determination of the binding constant of toxic small molecules to bovine serum albumin*, Biosystems in Toxicology and Pharmacology – Current Challenges, Online Meeting, 2022, **Oral Presentation**
37. Coutinho, P., Ribeiro, M. P., Miguel, S. P., Moreira, A. F., Filipe, H. A. L. *Interaction of near infrared (NIR)-light responsive probes with lipid membranes: a molecular dynamics study*, 8th International Iberian Biophysics Congress, Bilbao, Spain, 2022, **Oral Presentation**
38. Griffith, M., Araújo, A., Travasso, R., Salvador, A., *Scaffold-mediated localized redox relays allow sensitive and site-specific regulation by hydrogen peroxide*, EMBO Workshop: thiol oxidation in Biology, Sant Feliu de Guixols, Spain, 2022, **Oral Presentation**
39. Pires, C., *Bioavailability and biotransformation of paralytic shellfish toxins assessed by permeability assays using Caco-2 monolayers*, BiTap - Biosystems in Toxicology and Pharmacology – Current Challenges, Online Meeting, 2022, **Oral Presentation**
40. Viegas, L. P., *Transition State Theory at the Service of Green Chemistry*, 8th EuChemS Chemistry Congress, Lisbon, Portugal, 2022. **Oral Presentation**

## International Posters (60)

1. Ferreira, P. O., Baptista, J. A., Almeida, A. C., Costa, G. P., Ferreira, L. T., Eusébio, M. E. S., Caires, F. J., Castro, R. A. E., *Menthol-valsartan Low Transition Temperature Mixtures (LTTMs): a thermoanalytical study*, MULTIS - Multiscale Phenomena in Condensed Matter, Kraków, Poland, online, 2022. **Poster** – Awards for best poster presentation”

2. Costa, G. P., Ferreira, P.O., de Almeida, A. C., Eusébio, M. E. S., Caires, F.J., *Thermal Analysis as a strategy of elucidation of pharmaceutical cocrystals and eutectic mixtures of norfloxacin*, CEEC-PCMSI - 1st Central and Eastern European Conference on Physical Chemistry and Materials Science, Split, Croatia, 2022. **Poster**

3. Ferreira, P.O., Costa, G. P., de Almeida, A. C., Ferreira, L. T., Baptista, J. A., Eusébio, M. E., Castro, R. A. E., Caires, F. J., *Mechanochemical synthesis of a dual-drug coamorphous system of Valsartan and Carvedilol*, CEEC-PCMSI - 1st Central and Eastern European Conference on Physical Chemistry and Materials Science, Split, Croatia, 2022. **Poster**

4. Ferreira, P. O., Baptista, J. A., Almeida, A. C., Costa, G. P., Ferreira, L. T., Eusébio, M. E. S., Caires, F. J., Castro, R. A. E., *Valsartan-Catechol Deep Eutectic System: A thermoanalytical study*, 8th EuChemS Chemistry Congress, Lisbon, Portugal 2022. **Poster**

5. Domingos, C. V., Aroso, R. T., Piccirillo, G., Maria, T. M. R., Eusébio, M. E. S., Castro, R. A. E., da Silva, G. J., Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M., *PLA-Curcumin films as next-generation food packaging materials*, XXVI Encontro Galego-Portugués de Química, Santiago de Compostela, Spain, 2022. **Poster**

6. Domingos, C. V., Aroso, R. T., Piccirillo, G., Maria, T. M. R., Eusébio, M. E. S., Castro, R. A. E., da Silva, G. J., Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M., *Photosensitive packaging materials for microorganism photoinactivation*, 8th EuChemS Chemistry Congress, Lisbon, Portugal, 2022. **Poster**

7. Santos, J. A.V., Peluso, F., Gamberini, M. C., Piccirillo, G., Baptista, J. A., Maria, T. M. R., Castro, R. A. E., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., *Novel Pitavastatin Calcium Forms: Insights Into a Complex Solid State System*, XXVI Encontro Galego Português de Química. Santiago de Compostela Spain, 2022. **Poster**

8. Encarnação, T., Mateus, A., Gaspar, F., Santinha, D., Massano, A., Biscaia, S., Guincho, P. B., Nogueira, B. A., Castro, R. A. E., de Carvalho, T. A., Eusébio, M. E. S., Fausto, R., Sobral, A. J. F. N., *Bioremediation using microalgae and circular economy approach: a case study*, Materials – Exploring a better future, Marinha Grande, Portugal, 2022. **Poster**

9. Ildiz, G. O., Fausto, R., *Multivariate Statistical Models Based on IR and Raman Spectroscopic Data of Blood Plasma for Auxiliary Diagnosis of Mental Disorders*, EuChemS IUPAC 2022, Lisboa, Portugal, 2022. **Poster**

10. Nogueira, B. A., Lopes, S. M. M., Carvalho, M., Milani, A., André, V., Rodrigues, A. C. B., Lopes, S., Nikitin, T., Paixão, J. A., Eusébio, M. E. S., Pinho e Melo, T. M. V. D., Duarte, M. T., Castiglioni, C., Fausto, R., *Design, Synthesis and Characterization of Novel Color Polymorphic Materials*, Encontro com a Ciência e a Tecnologia em Portugal, Lisboa, Portugal, 2022. **Poster**

11. Amado, P. S. M., Lopes Jesus, A. J., Paixão, J. A., Fausto, R., Cristiano, M. L. S., *Comparison between Structure and Energetic Properties among Trioxolane and Tetraoxane Analogues with Established Antiparasitic Activity*, EuChemS IUPAC 2022, Lisboa, 2022. **Poster**

12. Encarnação, T., Mateus, A., Gaspar, F., Massano, A., Biscaia, S., Guincho, P. B., Nogueira, B. A., Carvalho, T. A., Fausto, R., Sobral, A. J. F. N., *Microalgae Biorefinery: High-value Products from Bioremediation Processes*, International Conference on Advanced Research on Sustainable Intelligent Manufacturing (RESIM 2022), Leiria, Portugal, 2022. **Poster**

13. A. Duque-Prata, K.K. Mental, P.J.S.B. Caridade, C. Serpa, L.G. Arnaut, *Intramolecular electron transfer reactions: what happens in polar solvents?*, Gordon Research Conference Electron Donor-Acceptor Interactions, Newport (RI), USA, 31/7-5/8/2022. **Poster**
14. A. Duque-Prata, C. Serpa, P.J.S.B. Caridade, *Delving into an user-friendly method to calculate redox potentials of organic compounds*, Gordon Research Seminar Electron Donor-Acceptor Interactions, Newport (RI), USA, 30-31/7/2022. **Poster**
15. D. Amado, C. Serpa, *Photoacoustic Calorimetry Study of the Conformational Variation of the Chignolin Peptide Induced by a pH Jump*, 21st International Conference on Photoacoustic and Photothermal Phenomena, Bled, Slovenia, 19-24/6 2022. **Poster**
16. Masliy, V., Rodrigues, F. M. S., Felgueiras, A. P., Silva, M. F. C., Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M., *Catalytic Processes via Flow Chemistry for Sustainable Synthesis of Value-Added Products*, XXII International Symposium on Homogeneous Catalysis (XXII ISHC), Lisboa, Portugal, 2022. **Poster**
17. Marques, D. L., Piccirillo, G., Rodrigues, F. M. S.; Calvete, Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., *Development of oxidative catalytic processes in continuous flow chemistry for drug degradation*, Encontro Galego-Portugués de Química, Santiago de Compostela, Espanha, 2022. **Poster**
18. Cruz, I. G., Gil, J. M., Ferreira, F. S., Pereira, M. M., Carrilho, R. M. B., *Carbon Materials as Renewable Catalysts for CO<sub>2</sub> Addition to Epoxides*, XXVI Encontro Galego-Portugués de Química, Santiago de Compostela, Espanha, 2022. **Poster**
19. Silva, M. F. C., Aroso, R. T., da Silva, G. J., Rodrigues, F. M. S., Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M., *Development of Potential Antibacterial Agents through Sustainable Synthetic Strategies*, XXVI Encontro Galego-Portugués de Química, Santiago de Compostela, Espanha, 2022. **Poster**
20. Serra, M. E., Rebelo, R., Gonçalves, L. P. C., Fonseca, A. C., Fonseca, J., Rola, M., Coelho, J. F. J., Rola, F., Serra, A. C., *Degradation Studies of PLA/PBAT Blends in Simulated Marine Environments*, 9th International conference on green chemistry (ICGC), Athens, Greece, 2022. **Poster**
21. Machado, T. F., Santos, F. A., Serra, M. E. S., Murtinho, D., Valente, A. J. M.,  *$\beta$ -Ketoenamine Covalent Organic Frameworks – Effects of Functionalization on Pollutant Adsorption*, IX Iberian Meeting on Colloids and Interfaces (RICI IX), Santiago de Compostela, Spain, 2022. **Poster**
22. Matias, P.M.C., Murtinho, D., Valente, A.J.M., *Synthesis of porous organic polymers for dye adsorption and heterogeneous catalysis*, IX Iberian Meeting on Colloids and Interfaces (RICI IX), Santiago de Compostela, Spain, 2022. **Poster - Best Poster Communication**
23. Jesus, C. F., Murtinho, D., Alves, A. A. S., Antunes, F. E., *New alkyl glycoside hydrochlorides: Synthesis, physico-chemical characterization and biodegradability*, IX Iberian Meeting on Colloids and Interfaces (RICI IX), Santiago de Compostela, Spain, 2022. **Poster**
24. Vareda, J. P., Braga-Gomes, M., Murtinho, D., Valente, A. J. M., Durães, L., *Chitosan-based aerogel adsorbents for the removal of priority pollutants*, 6th International Seminar on Aerogels, Hamburg, Germany, 2022. **Poster**
25. Vareda, J. P., Braga-Gomes, M., Murtinho, D., Valente, A. J. M., Durães, L., *Chitosan-silica hybrid aerogels for pollutants sorption*, Spanish-Portuguese Industry-Academia Aerogel Meeting, Coimbra, Portugal, 2022. **Poster**
26. Cabral, A. M.T.D.P.V., Estesio, M. A., Valente, A. J. M., Ribeiro, A. C. F., *A comparative study between the behavior diffusion of 5-Fluorouracil in  $\alpha$ -cyclodextrin and sodium dodecyl sulphate aqueous solutions*, IX Iberian Meeting on Colloids and Interfaces (RICI IX), Santiago de Compostela, Spain, 2022. **Poster**
27. Gomes, C., Royo, B., Martins, L. M. D. R. S., Pineiro M., *Looking for the sustainable synthesis of new catalysts* XXII International Symposium on Homogeneous Catalysis, Lisboa, Portugal, 2022. **Poster**

28. Pinero, M., Gonçalves, L. P. C., Rebelo, R., Fonseca, A. C., Fonseca, J., Rola, M., Coelho, J. F. J., Rola, F., Serra A. C., *The effect of organic acids on the degradation of PLA/PBAT blends* 9<sup>th</sup> IUPAC International Conference on Green Chemistry, Atenas, Greece, 2022. **Poster**
29. Bártolo, I., Moranguinho, I., Gonçalves, P., Borrego, P., Gomes, P., Gonçalves, F., Alves, A. J. S., Alves, N. G., Caixas, U., Pinto, I. V., Paixão, P., Cabrera, C., Ballana, E., Correia, V., Andrade, H. R., Pinho e Melo, T. M. V. D., Taveira, N., *Spiro- $\beta$ -lactam BSS-730A presents potent activity against RNA respiratory viruses and HIV*, ASM Microbe 2022, Washington DC, USA, 2022. **Poster**
30. Afonso, M. B., Marques, V., Pereira, D. M., David, J. C., Trindade, A., Aniceto, N., Capela, R., Lopes, F., Ressurreição, A. S., Pereira, R., Paulo, A., Frizzo, C. P., Marques, M. M. B., Pinho e Melo, T. M. V. D., Pedrosa, R., Salmán, M., Jaouen, G., Pigeon, P., Alves, C., Gaspar, H., Pedrosa, R., Ferreira, M. J. U., Duarte, A., Guedes, R., Moreira, R., Afonso, C. A. M., Rodrigues, C. M. P., *Discovery of novel colon cancer stem cell inhibitors by inducing multiple regulated cell death pathways*, Conference United European Gastroenterology (UEG), Vienna, Austria, 2022. **Poster**
31. Ribeiro, A. C. F., Rodrigo, M. M., Valente, A. J. M., Estesó, M. A., Cabral, A. M. T. D. P. V., *Diffusion of sodium salicylate in aqueous solutions containing sodium dodecyl sulfate*, IX Iberian Meeting on Colloids and Interfaces - RIC19, Santiago de Compostela, Spain, 2022. **Poster**
32. Cabral, A. M. T. D. P. V., Estesó, M. A., Valente, A. J. M., Ribeiro, A. C. F., *A comparative study between the behaviour diffusion of 5-Fluorouracil in beta-cyclodextrin and in sodium dodecyl sulphate aqueous solutions*, IX Iberian Meeting on Colloids and Interfaces - RIC19, Santiago de Compostela, Spain, 2022. **Poster**
33. Lorca, S., Conesa, J. J., Valente, A. J. M., Santos, F., Romero, A. J. F., *Hidrogeles de Poli(vinil alcohol) para Baterías de Zinc-ion. Coeficientes de permeabilidad, difusión y porosidad*. XLII Reunión del Grupo Especializado de Electroquímica de la RSEQ (42 GERSEQ 2022), Santander, Spain, 2022. **Poster**
34. Santos, C. I. A. V., Ribeiro, A. C. F., Bou-Ali, M.M., Mialdun, A. Shevtsova, V., *Stable and unstable component separation in Soret experiments with TEG-water mixture*, 27th European Low Gravity Research Association Biennial Symposium and General Assembly, Lisboa, Portugal, 2022. **Poster**
35. Cunha, C., Peixoto, M., Santos, J. R., Abreu, P. E., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *Efficient design of 3,6-di-tert-butyl-diphenyldibenzofulvene derivatives with enhanced aggregation induced-emission*, VII Jornadas Ibéricas de Fotoquímica (JIF 2022), University of Alcalá, Madrid (Spain), 2022. **Poster**
36. Peixoto, M., Rodrigues, A. C. B., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *Fluorene reactivity with light*. VII Jornadas Ibéricas de Fotoquímica, Alcalá de Henares, Espanha, 2022. **Poster**
37. Pina, J., Jerónimo, G. G., Pinho e Melo, T. M. V. D., Pineiro, M., *TTA-UC emitter based on aggregated Pt(II) Chlorin immobilized with tetraphenylethylene in cellulose acetate films*, EuChemS2022 - Chemistry Congress, Lisbon, Portugal, 2022. **Poster**
38. Araújo, J. G., Carmo, C., Pereira, L. C. J., Sobral, A. J.F.N., *Synthesis and characterization of Iron-based Metal-Organic Frameworks from terephthalic acid derivatives for Cancer Photodiagnostic and Magnetic Hyperthermia Therapy*, 8th EuChemS Chemistry Congress, Lisboa, Portugal, 2022. **Poster**
39. Carmo, C., Araújo, J. G., Kleman, L. F., Laranjo, M., Sobral, A. J. F. N., *Preparation of 3,5-difluoro-2,4,6-tris(perfluorophenoxy) benzaldehyde for the synthesis and characterization of BODIPY (meso-trisperfluorophenoxyphenyl)*, 8th EuChemS Chemistry Congress, Lisboa, Portugal, 2022. **Poster**
40. Guincho, P. B., Silva, L. P., Nicolau, N., Costa, A. M., Cruz, A., Artur Mateus, A., Sobral, A. J. F. N., Encarnação, T., *Microalgae technology: A sustainable alternative for the chemical industry*, CHEMEET 2022 - International Chemistry Conference. Virtual Conference organizada pelo CDRSP – Centro para o Desenvolvimento Rápido e Sustentado de Produto do Politécnico de Leiria, 2022. **Poster**
41. Mendes, M., António, M., Silva, A. L., Ramos, M. L., Sereno, J., Oliveira, R., Gomes, C., Castelo-Branco, M., Sousa, J., Pais, A., Vitorino, C., *A multifunctional hybrid-nanoparticle for glioblastoma chemo-photothermal*

*synergistic therapy*, IX Iberian Meeting on Colloids and Interfaces (RICI IX), 2022, Santiago de Compostela, 2022. **Poster**

42. Ferreira, N.R., Fialho S., Fortuna A., Vitorino C., *Optimizing nanostructured lipid carriers for the intra nasal administration of paroxetine and escitalopram in the treatment of depression*. 1st Advances in Polymeric Micelles for Therapeutic Applications, Coimbra, 2022. **Poster**

43. Basso, J., Mendes M., Cova T., Sousa J., Pais A., Fortuna A., Vitorino R., Vitorino C., Ferreira N.R., Fialho S., Fortuna A., Vitorino C., *Optimizing nanostructured lipid carriers for the intra nasal administration of paroxetine and escitalopram in the treatment of depression*. 1st Advances in Polymeric Micelles for Therapeutic Applications, Coimbra, 2022. **Poster**

44. Basso, J., Mendes M., Cova T., Sousa J., Pais A., Fortuna A., Vitorino R., Vitorino C., *Taking the most out of lipids: A systematic design of lipid-based nanoparticles*. 1st Advances in Polymeric Micelles for Therapeutic Applications, Coimbra, 2022. **Poster**

45. Mendes, M., Gomes-da-Silva L.M., Arnaut L.G., Vale N., Sousa J., Pais A., Vitorino C., *Demystifying the passage through the blood-brain barrier using CPPs*. 1st Advances in Polymeric Micelles for Therapeutic Applications, Coimbra, 2022. **Poster**

46. P. O. Ferreira, A. C. Almeida, G. de P. Costa, J. A. Baptista, L. T. Ferreira, M. E. S. Eusébio, R. A. E. Castro, F. J. Caires, *Estudo termoanalítico de um LTTM (mistura de baixa temperatura de transição)*, 35° Congresso Latino-americano de Química - 61° Congresso Brasileiro de Química, Rio de Janeiro, Brasil, 2022. **Poster**

47. Costa, G.P.; Ferreira P.O.; de Almeida, A.C.; Porto, M.V.; Silva, P. S. P.; Castro, R. A. E.; Eusébio, M. E. S.; Caires, F.J., *Investigação de formas sólidas multicomponente de norfloxacino*, 35° Congresso Latino-americano de Química - 61° Congresso Brasileiro de Química, Rio de Janeiro, Brasil, 2022. **Poster**

48. Cardoso, R. M. S, Martins, P. A. T., Ramos, C. V., Cordeiro, M. M., Moreno, M. J., *Effect of dipole moment on amphiphile solubility and partition into  $\alpha$ o and  $\alpha$ d lipid bilayers*, 8<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress, Bilbao, Spain, 2022, **Poster**

49. Cordeiro, M. M., Salvador, A., Moreno, M. J., *Analysis of different methods to calculate permeability coefficients*, 8<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress, Bilbao, Spain, 2022, **Poster**

50. Foulquié, E., Pires, C., Crus, P., Ribeiro, V., Moreno, M., Castro, M., Vaz, D.C., *Antioxidant potential of *Otanthus maritimus* leaves*, Biosystems in Toxicology and Pharmacology – Current Challenges, Online Meeting, 2022, **Poster**

51. Geraldés, C.F.G.C., Suh, E.H., Chirayil, S., DeBerardinis, R.J., Sherry, A.D., *Detection of glucose-derived D- and L-lactate in erythrocytes and cancer cells by use of a chiral NMR shift reagent*, 8th EuChemS Chemistry Congress (ECC8), Lisbon, Portugal, 2022. **Poster**

52. Oliveira, A. C., Filipe, H. A. L., Sun, R., Voth, G. A., Geraldés, C. F. G. C., Moreno, M. J., Loura, L. M. S., *Interaction of contrast agents with biomembranes*, 8<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress, Bilbao, 2022, **Poster**

53. Peskin, A.P., Meotti, F.C., de Souza, L.F., Magon, N.J., Salvador, A. and Winterbourn, C.C. *Mechanistic studies of the rapid glutathionylation of peroxiredoxin 2*, EMBO Workshop: thiol oxidation in Biology, Sant Feliu de Guixols, Spain, 2022, **Poster**

54. Pires, C. L., Praça, C., Bastista de Carvalho A. L. M., Ferreira, L., Marques, M. P. M., Moreno, M. J., *Validation of the re-use of Caco-2 monolayers for multiple permeability assays*, 8<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress, Bilbao, Spain, 2022, **Poster**

55. Sousa, T., Travasso, R., Salvador, A., *How far can hydrogen peroxide and superoxide travel in the microcirculation?* 8th International Iberian Biophysics Congress, Bilbao, Spain, 2022, **Poster**

56. Sousa, T., Travasso, R., Salvador, A., *How far can hydrogen peroxide signal in the microcirculation?*, EMBO Workshop: thiol oxidation in Biology, Sant Feliu de Guixols, Spain, 2022, **Poster**
57. Almeida, Z.L., Brito, R. M. M., *Clearance of amyloid fibrils in amyloidosis: from in silico approaches to in vitro activity*, 8th International Iberian Biophysics Congress, Bilbao, Spain, 2022, **Poster**
58. Sérgio P. J. Rodrigues. *Sousa Martins or the dangers of being dead*. 10th European Conference on Mental Health, Lisbon September 14-16, 2022 – (inscrição oferecida) – **Poster**
59. Mendonca, D.A., Cadima-Couto, I., Schaberle, F.A., Veiga, A.S., Arnaut, L.G., Castanho, M.A.R.B., Cruz-Oliveira, C. *Repurposing drugs to fight COVID-19: SARS-CoV-2 envelope targeting by clinically approved porphyrins and analogues*. FEBS OPEN BIO, 12, 166-166, Supplement 1 **Meeting Abstract** P-02.1-031. JUL 2022.
60. Flora, S., Brites-Pereira, M., Hipólito, N., Silva, C.G., Gordo, J., Morais, N., Ribeiro, J., Silva, F., Burtin, C., Brooks, D., Marques, A., Cruz, J. (2022). *End-users' perspectives of an eHealth platform to promote physical activity in COPD: a qualitative study*. PA1801. European Respiratory Society International Congress 2022, 4 a 6 de Setembro. Barcelona, Espanha. Eur Respir J 2022; 60: Suppl. 66, 2531. **Poster**  
DOI: <https://doi.org/10.1183/13993003.congress-2022.2531> - Indexado em: Scopus; Web of Science



## Communications at National Meetings (94)

### National Keynotes / Plenary / Invited Lectures (17)

1. Fausto, R., *IR-Induced and Tunneling Reactions in Cryogenic Matrices: The (Incomplete) Story of a Successful Endeavor*, Forum CQE 2022, Lisboa, 2022 (online). **Plenary Lecture**
2. Luis G. Arnaut., *Terapia Fotodinâmica*. RG4 2020 Meeting – CIQUP/IMS - Science for a Better World, Porto, 20/12/2022. **Keynote Lecture**
3. Luis G. Arnaut., *Fotoquímica*. Associação Nacional de Estudantes de Química, online de Lisboa, 30/11/2022. **Invited Lecture**
4. Luis G. Arnaut, *Interesting things we can do with light in Health, Materials and the Environment*, ChemForum, Online de Lisboa, 19/05/2022. **Invited Lecture**
5. Luis G. Arnaut, *Photodynamic therapy of cancer from a molecular perspective*, VIII Encontro Nacional de Estudantes de Química, Coimbra, 8-10/04/2022. **Plenary Lecture**
6. Maria Inês P. Mendes, *Photoacoustic Imaging and Delivery*, IEEE-SB-UC Student Association, Online, 2/06/2022. **Invited Lecture**
7. Carrilho, R. M. B., Aroso, R. T., *Bioplásticos – Moléculas Mais Sustentáveis*, Escola Molecular, Coimbra, Portugal, 2022. **Invited Oral Presentation**
8. Carrilho, R. M. B., *Bioplásticos – Uma Alternativa mais Sustentável*, Olimpíadas de Química Júnior - Semi Final Coimbra 2022, Departamento de Química FCTUC, Coimbra, Portugal, 2022. **Invited Oral Presentation**
9. Soares, M. I. L., *Pirrolol[1,2-c]tiazóis Quirais: à Descoberta de Novos Agentes Ativadores da Proteína p53 para a Terapia do Cancro Colorretal*, VIII Encontro Nacional de Estudantes de Química – ENEQUI'22, Coimbra, Portugal, 2022. **Invited Oral Presentation**
10. Burke A. J., *Accessing New Bioactive Molecules using Sustainable Transition Metal Catalysis*, 14th National Organic Chemistry Meeting/7th National Therapeutic Chemistry Meeting Portuguese Chemical Society, Caparica, 2022. **Invited Oral Presentation**
11. Marques, J. M. C., *Computational chemistry research at Minho Advanced Computing Center*, MACC User Group (MUG) Workshop, Porto, Portugal, 2022. **Invited Oral Presentation**
12. Pais, A., *DNA compaction and the adsorption behavior of polyplexes*, First advances in polymeric micelles for therapeutic applications, FFUC, Coimbra, 2022. **Invited Oral Presentation**
13. Campos, M.G., *Food-Drug Interactions: What we should know*. XVI Encontro de Química dos Alimentos. Instituto Politécnico de Castelo Branco, Outubro 2022. **Keynote Lecture**
14. Cordeiro, M. M., *Permeation of weak acids and bases through lipid bilayers: modelling and validation of a pH variation assay*, VIII ENEQUI, Coimbra, 2022. **Invited Oral Presentation**
15. Geraldés, C. F. G. C., *Rare Earths: not so rare but some are critical*, Lisbon Academy of Sciences, Lisboa, 2022. **Invited Plenary Lecture**
16. Moreno, M. J., *Effect of food ingredients on cholesterol bioavailability. In vitro studies using Caco-2 cell monolayers*, Webinar Biophysical properties of food-based ingredients and their bioactive potential, Online, 2022. **Invited Oral Presentation**
17. Varandas, A. J. C., “A new look at old challenges in quantum chemistry”, Academia das Ciências de Lisboa (May 12, 2022). **Plenary Lecture**

## National Oral Presentations (29)

1. Castro, R. A. E., Santos, J. A. V., Baptista, J. A., Santos, I. C., Maria, T. M. R., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., *Pharmaceutical Cocrystals and Nanococrystals*, Encontro Ciência 2022, Lisboa, Portugal, 2022. **Oral Presentation**
2. Roque, J. P. L., *Há Química ao fundo do Túnel*, World Quantum Day – SPQ, 2022 (online). **Oral Presentation**
3. Nunes, C. M., *Manipulation of Organic Molecules by Vibrational Excitation with Near-Infrared Light*, 14th National Organic Chemistry Meeting and 7th National Medicinal Chemistry Meeting, Lisboa, 2022. **Oral Presentation**
4. Maria Inês P. Mendes, Catarina S. Lobo, Diogo A. Pereira, Luis G. Arnaut, *Can Photodynamic Therapy efficacy be increased with Photoacoustic delivery of the Photosensitizer?*, VIII Encontro Nacional de Estudantes de Química, Coimbra, 9/04/2022. **Oral Presentation**
5. Carrilho, R. M. B., Aroso, R. T., Piccirillo, G., Costa, C., Paixão, F., Pereira, M. M., *Química Verde: Mudança de Paradigma no Ensino Experimental das Ciências*, Encontro “Supervisão e Avaliação na Vida das Escolas” / V Seminário Internacional de Educação em Ciências, Castelo Branco, Portugal, 2022. **Oral Presentation**
6. Rodrigues, F. M. S., Carrilho, R. M. B., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., *Sequential catalytic processes for the sustainable synthesis of fine chemicals*, Encontro Ciência 2022, Lisboa, Portugal, 2022. **Oral Presentation**
7. Carrilho, R. M. B., *Bioplásticos – em Busca de um Futuro Sustentável*, Promoção da Cultura Científica UC, Departamento de Química FCTUC, Coimbra, Portugal, 2022. **Oral Presentation**
8. Carrilho, R. M. B., *Bioplásticos para um Futuro Sustentável – Uma Contribuição da UC*, Programa Cientificamente Provável, promovido pela Rede de Bibliotecas Escolares, Centro Educativo dos Olivais, Coimbra, Portugal, 2022. **Oral Presentation**
9. Carrilho, R. M. B., *Bioplásticos para um Futuro Sustentável – Uma Contribuição da UC*, Programa Cientificamente Provável, promovido pela Rede de Bibliotecas Escolares, Escola Secundária Joaquim de Carvalho, Figueira da Foz, Portugal, 2022. **Oral Presentation**
10. Domingos, C. V., Aroso, R. T., Piccirillo, G., Maria; T. M.R., Eusébio, M. E. S., Castro, R. A. E; Silva, G. J., Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M. *Filmes de PLA-Curcumina: novos materiais fotodescontaminantes para embalagens alimentares*, VIII Encontro Científico do NEQ/AAC, Coimbra, Portugal, 2022. **Oral Presentation**
11. Pinto, S. M. A., Ferreira, A. R. R., Teixeira, D. S. S., Carvalho, A. L. M. B., Marques, M. P. M., Geraldes, C. F. G. C., Pereira, M. M., *Fluorinated Platforms for MRI Imaging*, 14<sup>th</sup> National Organic Chemistry Meeting & 7<sup>th</sup> National Medicinal Chemistry Meeting, Costa da Caparica, Portugal, 2022. **Oral Presentation**
12. Matias, P. M. C., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Polímeros orgânicos porosos: síntese e aplicação em adsorção de corantes e catálise*, VIII Encontro Científico NEQ-AAC, Coimbra, 2022. **Oral Presentation**
13. Pineiro, M., *Sustainability and Mechanochemistry*, VIII Encontro Nacional de Estudantes de Química – ENEQUI’22, Coimbra, Portugal, 2022. **Oral Presentation**
14. Soares, M. I. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Synthesis of Chromeno-Fused Systems via Lewis Base-Dependent [3+2] or [3+3] Annulation Reactions of Allenic Esters and 3-Nitro-2H-chromenes*, 14th National Organic Chemistry Meeting/7th National Medicinal Chemistry Meeting (14ENQO/7ENQT), Caparica, 2022. **Oral Presentation**
15. Alves, A. J. S., Bártolo, I., Taveira, N., Pinho e Melo, T. M. V. D., *New Chiral Spiro-β-Lactams via [3+2] annulation of allenates with 6-alkylidenepenicillanates: Synthesis and Anti-HIV Activity*, 14th National Organic

Chemistry Meeting/7th National Medicinal Chemistry Meeting (14ENQO/7ENQT), Caparica, 2022. **Oral Presentation**

16. Alves, C. A., Cardoso, A. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Synthesis of chiral 2-(tetrazol-5-yl)-2H-azirines: an approach to molecules with relevance in medicinal chemistry*, 14th National Organic Chemistry Meeting/7th National Medicinal Chemistry Meeting (14ENQO/7ENQT), Caparica, 2022. **Oral Presentation**

17. Gonçalves, J. V., Alves, A. J. S., Bártolo, I., Taveira, N., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Novos Espiro- $\beta$ -Penicilanos via Cicloadição [3+2] Formal Catalisada por Fosfina entre Alenoatos e 6-Alquilidenopenicilano*, VIII Encontro Nacional de Estudantes de Química – ENEQUI'22, Coimbra, Portugal, 2022. **Oral Presentation**

18. Marques, J. M. C., *Energy landscapes and thermodynamics of colloidal clusters modeled with isotropic potentials*, IX Iberian Meeting on Colloids and Interfaces (RICI9), Santiago de Compostela, Spain, 2022. **Oral Presentation**

19. Marques, J. M. C., *Evolutionary algorithm for global optimization of binary atomic clusters*, Working Group 3 Virtual Symposium of COSY COST Action, online, 2022. **Oral Presentation**

20. Paiva, I., Sofio, S., L. Cunha, L., Ribeiro, A., *Inferring hydrodynamics from spring discharge analysis in the Sicó-Degracias karst aquifer (Pombal, Portugal). Importance for the aquifer vulnerability evaluation*, 4º Encontro Internacional CEGOT, Sessão 10 - Natureza, ambiente e territórios sustentáveis, Porto, 2022. **Oral Presentation**

21. Fernandes, Guincho, P., Nicolau, N., Sobral, A., Mateus, A., Encarnação, T., *NABIA- New Approach to Biorremediation using Algae: Desafios da Economia Circular*, feira MOLDPLAS, Exposalão, Batalha, Portugal, 2022. **Oral Presentation.**

22. Dias, C. M. F., Silva, J. A., Ojeda, G., Silva, P. S. P., Paixão, J. A., Carvalho, L. A. E. B., Domingos, V. F., Gil, J. M., Quénéa, K., Sobral, A. J. F. N., *CO<sub>2</sub> capture by adsorption on biochar: Wood vs Sludge biochar*, VIII Encontro Científico do Núcleo de Estudantes de Química (NEQ), Coimbra, Portugal, 15 a 17 de novembro de 2022. **Oral Presentation**

23. Brites G., Basso J., Miranda M., Neves B.M., Vitorino C., Cruz M.T., *Preventing allergic contact dermatitis: in vivo proof-of-concept using the local lymph node assay*. SPF2022, Porto, 2022. **Oral Presentation**

24. Anjos, O., Campos, M.G., Lavado, I., Russo-Almeida, P., Vilas Boas, M., *Avanços na normalização do pólen Apícola*. III Colóquio Nacional de Plantas Aromáticas e Medicinais, 24 a 26 de março de 2022, Castelo Branco, 2022. **Oral Presentation**

25. Pinto, S. M. A., Ferreira, A. R. R., Teixeira, D. S. S., Batista de Carvalho, A. L. M., Marques, M. P. M., Geraldes, C. F. G. C., Pereira, M. M., *Fluorinated nanoplatforms for MRI Imaging*, 14<sup>th</sup> National Meeting of Organic Chemistry/7<sup>th</sup> National Meeting of Therapeutic Chemistry, Caparica, 2022. **Oral Presentation**

26. Sérgio P. J. Rodrigues; Carla Verdade; Patrícia Pinto; Ana Paula Branquinho. *A quimiofobia é uma realidade? Alterou-se com a pandemia? Análise de um inquérito realizado entre estudantes do ensino secundário*. X Congresso SciComPT, maio de 2022. Ponta Delgada. **Oral Presentation**

27. Sérgio P. J. Rodrigues, Antonio Riganelli. *Seeing beauty not only in art and nature but also in science*. XIII Congresso Internacional de História da Loucura, Psiquiatria e Saúde Mental. 5-7 de outubro de 2022. **Oral Presentation**

28. Isabel Marília Peres; Sérgio P. J. Rodrigues. *O laboratório químico da Casa Pia de Lisboa: uma viagem científica no período romântico*. 3º Encontro Saudade Perpétua, Alpiarça, 23-25 de outubro de 2022. **Oral Presentation**

29. Sérgio P. J. Rodrigues. *Aprendizagem da química na escola e aprendizagem em museus e nas ruas: semelhanças e diferenças, oportunidades e ameaças*. 10º Congresso Olhares sobre a Educação / 3rd

Internacional Congress on Perspectives on Education. Viseu, 22-24 novembro de 2022. **Oral Presentation**

### National Posters (48)

1. Baptista, J. A., Rosado, M. T. S., Maria, T. M. R., Castro, R. A. E., Canotilho, J., Eusébio M. E. S., *Determination of metastable zones for obtaining different polymorphs from crystallization from solutions*, VIII Encontro Nacional de Estudantes de Química (ENEQUI), Coimbra, Portugal, 2022. **Poster**

2. Diogo M. Barradas, Mário T.S. Rosado, Ricardo A. E. Castro, M. Ermelinda S. Eusébio, *Artesunate-Metoclopramide: A new dual-drug co-amorphous system*, ENEQUI- Encontro Nacional de Estudantes de Química, 8-10 Abril, Coimbra, Portugal, 2022. **Poster**

3. Serrão, G.D., Silva, J.F.C., Eusébio, M. E.S., Rosado, M.T.S., *Iodo e Bromo - Ligações de halogénio na formação de co-cristais*", VIII Encontro Científico NEQACC, 16 Novembro, Coimbra, Portugal, 2022. **Poster**

4. Braz, S., Justino, L., Pina, J., Ramos, M. L., Fausto, R., *Structural Characterization of W(IV) Alizarin Red S Complexes and Potential for Applications in Sensing*, VIII Encontro NEQ/AAC, Coimbra, 2022. **Poster**

5. Brito, A. L., Brügggen, C., Ildiz, G. O., Fausto, R., *Investigation of Menopause-Induced Changes on Hair by Raman Spectroscopy and Chemometrics*, VIII Encontro NEQ/AAC, Coimbra, 2022. **Poster**

6. Secrieru, A., Lopes, S., Cristiano, M.L.S., Fausto, R., *UV-Induced Tautomerization of Monomeric 3(5)-Aminopyrazole*, 14th National Organic Chemistry Meeting (14ENQO) and the 7th National Medicinal Chemistry Meeting (7ENQT), Lisboa, Portugal, 2022. **Poster**

7. O.A. Chaves, A.F.C. Tuna, R. Loureiro, Z. L. Almeida, J. Pina, R.M.M. Brito, C. Serpa, *Biophysical Characterization of the Interaction between Human Serum Albumin and Two Commercial Azo Food Dyes*, Biophysics Festival, Aveiro (Portugal) 3/6 2022. **Poster**

8. D. Amado, O.A. Chaves, R. Loureiro, Z.L. Almeida, C.S.H. Jesus, C. Serpa, R.M.M. Brito, *(One) microsecond dynamics and volume expansion in a single turn of  $\beta$ -hairpin peptide chignolin upon ultra-fast pH-jump*, Biophysics Festival, Aveiro (Portugal) 3/6 2022. **Poster**

9. A.F.C. Tuna, O.A. Chaves, Z.L. Almeida, J. Pina, C. Serpa, *Comparing the Interaction between Human Serum Albumin and Clinically Approved HIV Reverse Transcriptase Inhibitors: the Influence of Chemical Modification in Tenofovir Structure*, Biophysics Festival, Aveiro (Portugal) 3/6 2022. **Poster**

10. Arnaut, Z. A., Aroso, R. T., Pinto, S. M. A., Pereira, M. M., *Scale-up of cationic meso-imidazolyl porphyrin photosensitizers as antimicrobial agents*, 14<sup>th</sup> National Organic Chemistry Meeting & 7<sup>th</sup> National Medicinal Chemistry Meeting, Costa da Caparica, Portugal, 2022. **Poster**

11. Matias, P. M. C., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Synthesis of a porous organic polymer for dye adsorption and for heterogeneous catalysis of Henry reactions*, VIII Encontro Nacional de Estudantes de Química – ENEQUI'22, Coimbra, 2022. **Poster**

12. Braga-Gomes, M., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Synthesis and Characterization of Modified Chitosan for Heavy Metals Sorption*, VIII Encontro Nacional de Estudantes de Química – ENEQUI'22, Coimbra, 2022. **Poster**

13. Marques, C. U. F., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Biogéis baseados em quitosano e  $\beta$ -ciclodextrina para a remoção de cobre (II)*, VIII Encontro Científico NEQ-AAC, Coimbra, 2022. **Poster**

14. Bernardino, E. F., Matias, P. M. C., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Síntese de derivados de quitosano para a remoção de cobre(II) de soluções aquosas*, VIII Encontro Científico NEQ-AAC, Coimbra, 2022. **Poster**

15. Inácio, D. S., Ribeiro, A. C. F., Cabral, A. M. T. D. P. V., Veiga, F., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Aplicação de nanoesponjas de ciclodextrinas na remoção de antibióticos em água*, VIII Encontro Científico NEQ-AAC, Coimbra, 2022. **Poster – Best poster presentation**
16. Hendrikx, M. M., Ribeiro, J. L. P., Soares, M. I. L., Saraiva, L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Chiral 6,7-Bis(hydroxymethyl)-1H,3H-pyrrolo[1,2-c]thiazoles as Novel p53-Activating Agents to Improve Colorectal Cancer Targeted Therapy*, 14th National Organic Chemistry Meeting/7th National Medicinal Chemistry Meeting (14ENQO/7ENQT), Caparica, 2022. **Poster**
17. Pereira, A. M. R., Pereira, A. B., Soares, M. I. L. Soares, Saraiva, L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *6,7-Bis(hidroximetil)-1H,3H-pirrolol[1,2-c]tiazoles Quirais: Novos Agentes Ativadores da Proteína p53 para a Terapia do Cancro Colorretal*, VIII ENCONTRO CIENTÍFICO do NEQ/AAC, Coimbra, 2022. **Poster**
18. Costa, B. D. P., Braz, J., Lopes, S. M. M., Laranjo, M., Piñeiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Corroles & hidrazones: two allies in the fight against lung cancer*, VIII Encontro Nacional de Estudantes de Química – ENEQUI'22, Coimbra, Portugal, 2022. **Poster**
19. Cardoso, A. L., Paixão, J. A., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Bis-Furans: a sustainable source of structurally diverse scaffolds*, 14th National Organic Chemistry Meeting/7th National Medicinal Chemistry Meeting (14ENQO/7ENQT), Caparica, 2022. **Poster**
20. Costa, B. D. P., Braz, J., Lopes, S. M. M., Laranjo, Rodrigues, A. C. B., Piñeiro, P., Seixas de Melo, J. S., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Trans-A<sub>2</sub>B-Corroles containing a hydrazone moiety: a new class of photosensitizers for photodynamic therapy of lung cancer*, 14th National Organic Chemistry Meeting/7th National Medicinal Chemistry Meeting (14ENQO/7ENQT), Caparica, 2022. **Poster**
21. Lopes, S. M. M., Benzi, A., Nunes, S. C. C., Pais, A. A. C. C., Tavani, C., Petrillo, G., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Reactivity of Ethyl Nitrosoacrylate toward Pyrrole, Indole and Pyrrolo[3,2-c]carbazole: An Experimental and Theoretical Study*, 14th National Organic Chemistry Meeting/7th National Medicinal Chemistry Meeting (14ENQO/7ENQT), Caparica, 2022. **Poster**
22. Braz, J., Costa, B. D. P., Lopes, S. M. M., Laranjo, M., Piñeiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *trans-A<sub>2</sub>B-Corroles containing an oxime moiety: novel photosensitizers for photodynamic therapy of lung cancer*, 14th National Organic Chemistry Meeting/7th National Medicinal Chemistry Meeting (14ENQO/7ENQT), Caparica, 2022. **Poster**
23. Grosso, C., Sase, T. J., Alves, N. G., Lemos, A., Cardoso, A. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Exploring the reactivity of tetrazolyl-2H-azirines towards arynes: selective synthesis of indole derivatives*, 14th National Organic Chemistry Meeting/7th National Medicinal Chemistry Meeting (14ENQO/7ENQT), Caparica, 2022. **Poster**
24. Ribeiro, J. L. P., Lopes, S. M. M., Saraiva, L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Novel β-carboline derivatives as potential anticancer agentes*, 14th National Organic Chemistry Meeting/7th National Medicinal Chemistry Meeting (14ENQO/7ENQT), Caparica, 2022. **Poster**
25. Mata, A. I., Pereira, N. A. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Silva, L. C. G., Simões, C. J. V., Brito, R. M. M., *Targeted-Photodynamic Therapy: New Photosensitisers That “Click”*, Ana I. Mata, Nélson A. M. Pereira, Teresa M. V. D. Pinho e Melo, Lúcia C. Gomes da Silva, Carlos J.V. Simões, Rui M. M. Brito. 14th National Organic Chemistry Meeting/7th National Medicinal Chemistry Meeting (14ENQO/7ENQT), Caparica, 2022. **Poster**
26. Costa, M. M., Cardoso, A. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., Brandão, P., Piñeiro, M., *Influência do catalisador em reações multicomponente de síntese e derivatização de furano*, VIII Encontro Nacional de Estudantes de Química – ENEQUI'22, Coimbra, Portugal, 2022. **Poster**
27. Duarte, B., Pinho e Melo, T. M. V. D., Piñeiro, M., Cardoso, A. L., *Transformações Mecanoquímicas de Furanos: Metodologias Sustentáveis para a Síntese de Heterociclos*, VIII Encontro Nacional de Estudantes de Química – ENEQUI'22, Coimbra, Portugal, 2022. **Poster**

28. Fangaia, S., Messias, A., Ribeiro, A. C., Valente, A., Guerra, F., Nicolau, P., *Comportamento tribocorrosivo do TiAlV:efeito do flúor e da amálgama no desgaste desta liga*. XLII Congresso Anual SPEMD 2022, Figueira da Foz, Portugal, 2022. **Poster**
29. Figueiredo, P. A. L., Barros, M.C.F., Santos, C.I.A.V, *Diffusion of Naphthalene in Dense Fluids*, VIII Encontro Nacional de Estudantes de Química – ENEQUI'22, Coimbra, Portugal, 2022. **Poster**
30. Ramos, A. R. A., Barros, M. C. F., Santos, C. I. A. V., *Diffusion of industrial solvents in EPDM in conditions of high stress*, VIII Encontro Nacional de Estudantes de Química – ENEQUI'22, Coimbra, Portugal, 2022. **Poster**
31. Santos, C. I. A. V., Barros, M. C. F., Ribeiro, A. C. F., *Transport properties for supercritical CO<sub>2</sub>-mixtures as insight for the geological storage of carbon dioxide*, VIII Encontro Nacional de Estudantes de Química – ENEQUI'22, Coimbra, Portugal, 2022. **Poster**
32. Sofio, S., Valente, A. J. M., Ribeiro, A. C. F., Paiva, I., *Inferir a vulnerabilidade dos aquíferos cársicos a partir da variaçãodas propriedades físico-químicas das nascentes: estudo dos Olhos d'Água do Anços, Pombal, Portugal*, Encontro Científico, Departamento de Química, FCTUC, NEQ/AAC (Núcleo de Estudantes do Departamento de Química), Universidade de Coimbra, 2022 Portugal. **Poster**.
33. Silva, D. S. A., Fangaia, S. I. G., Nicolau, P. M. G., Valente, A. J. M., Ribeiro, A. C. F., *Análise do comportamento de sais de níquel em saliva artificial e na presença de ciclodextrinas, analisado por coeficientes de difusão mútua*, Encontro Científico, Departamento de Química, FCTUC, NEQ/AAC (Núcleo de Estudantes do Departamento de Química), Universidade de Coimbra, 2022 Portugal. **Poster**.
34. Trindade, A. C. V., Silva, D., Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., Nicolau, P. M. G., Fangaia, S. I. G., *Interação entre ião cobalto e β-ciclodextrinas analisada através de coeficientes de difusão mútua*, Encontro Científico, Departamento de Química, FCTUC, NEQ/AAC (Núcleo de Estudantes do Departamento de Química), Universidade de Coimbra, 2022. Portugal. **Poster**.
35. Santos, C., Barros, M., Ribeiro, A., *Transport properties for supercritical CO<sub>2</sub>-mixtures as insight for the geological storage of carbon dioxide*, VIII Encontro Científico do NEQ/AAC, Coimbra, Portugal, 2022. **Poster**
36. Kleman, L. F., Araújo, J., Carmo, C., Beltran, A. C., Melo, J. S. S., Sobral, A. J. F. N., *Synthesis and Photophysical characterization of a (meso-phenyl-meso) BODIPY dimer*, VIII Encontro Nacional de Estudantes de Química - ENEQUI'22, Coimbra, Portugal, 2022. **Poster**
37. Dias, C. M. F., Silva, J.A., Ojeda, G., Silva, P. S. P., Paixão, J. A., Carvalho, L. A. E. B., Domingos, V. F., Gil, J. M. Quénéa, K Sobral, A. J. F. N., *CO<sub>2</sub> capture by adsorption on gasified pine biochar*, VIII Encontro Científico do Núcleo de Estudantes de Química (NEQ), Coimbra, Portugal, 2022. **Poster**
38. Paula, V.; Pedro, S.; Campos, M.G., Delgado, T., Estevinho, L., Anjos, O., *Bioatividade de flores de Acacia dealbata L. com potencial terapêutico*. III Colóquio Nacional de Plantas Aromáticas e Medicinais (CNPAM2022), Castelo Branco, 24 a 26 de março, 2022. **Poster**
39. Cordeiro, M. M., Salvador, A., Moreno, M. J., *Analysis of different methods to calculate permeability coefficients*, Biophysics Festival, Aveiro, 2022, **Poster**
40. Foulquié, E., Pires, C. L., Cruz, P. F., Ribeiro, V. S., Moreno, M. J., Castro, M., Vaz, D. C., *Bioactive potential of Mediterranean plants: Component analysis and antimicrobial properties of Othantus maritimus*. Biophysics Festival, Aveiro, 2022, **Poster**

41. Oliveira, A. C., Filipe, H. A. L., Salvador, A., Sun, R., Voth, G. A., Geraldes, C. F. G. C., Moreno, M. J., Loura, L. M. S., *Modelling GdDOTA for molecular dynamics simulations in water and in presence of lipid bilayers*, Biophysics Festival, Aveiro, 2022, **Poster**
42. Peralta, C., Almeida, Z. C., Lagoa, R., Vaz, D. C., *Protein-ligand interactions: The case of humic acid and laccase*. Biophysics Festival, Aveiro, 2022, **Poster**
43. Pires, L. C., Praça, C., Batista de Carvalho, A. L. M., Ferreira, L., Marques, M. P. M., Moreno, M. J., *Validation of the re-use of Caco-2 Monolayers for multiple permeability assays*, Biophysics Festival, Aveiro, 2022, **Poster**
44. Ramos, C. V., Cerqueira de Abreu, R., Martins, P. A. T., Fernandes, H., Ferreira, L., Moreno, M. J., *Biophysical characterization of the mechanisms of transfection agents for the use of exosomes in gene therapy*, Biophysics Festival, Aveiro, 2022, **Poster**
45. Almeida, Z. L., Ferreira, E., Cruz, P. F., Simões, J. V. S., Brito, R. M. M., *Towards the design of drug-like compounds that break amyloid fibrils: transthyretin, a case-study*, Biophysics Festival 2022, Aveiro, Portugal, 2022, **Poster**.
46. Loureiro, R. J., Cunha, A., Rosário-Ferreira, N., Brito, R.M.M., *Non-structural protein 1 (NS1) as a drug target for seasonal and pandemic influenza*, Biophysics Festival – 2<sup>nd</sup> Meeting of Young Biophysicists, Aveiro, Portugal, 2022. **Poster**.
47. Morais, N., Hipólito, N., Flora, S., Oliveira, A., Pimenta, S., Gordo, J., Pinto, D., Silva, C.G., Ribeiro, J., Silva, F., Brites-Pereira, M., Sargento, A., Simões, P., Brooks, D., Burtin, C., Marques, A., Cruz, J. (2022). *Aceitabilidade e viabilidade da intervenção OnTRACK para promoção da atividade física em pessoas com DPOC: Protocolo de estudo*. 1.º Congresso Português de Medicina do Estilo de Vida. 7 a 9 de Novembro. Lisboa, Portugal. **Poster**
48. Hipólito, N., Flora, S., Gordo, J., Pimenta, S., Morais, N., Silva, C.G., Ribeiro, J., Silva, F., Oliveira, A., Brites-Pereira, M., Carreira, B.P., Andrade, L., Martins, V., Rodrigues, F., Brooks, D., Burtin, C., Marques, A., Cruz, J. (2022). *Are indoor and outdoor opportunities for physical activity related to active behaviours in patients with COPD?*. *Pneumology* 8(Esp Cong 3):34-98, PC 041 (pp.51). 38º Congresso de Pneumologia, 10 a 12 de Novembro. Albufeira, Portugal. **Poster**  
 URL: <https://www.journalpulmonology.org/en-pdf-X2531043722034190> - Indexado em: Web of Science

## Conferences / Seminars Organization (26)

1. Eusébio, M. E. S., Multis2022 — Multiscale Phenomena in Condensed Matter, Kraków, Poland, online, 2022, 27-30 June 2022. (**Member of the Scientific Committee**) – online
2. Fausto, R., EuChemS 2022, Lisboa, Portugal, 28 Agosto - 1 Setembro 2022 (**Member of the Organizing Committee**).
3. Fausto, R., 12th Congress of the International Society for the Interdisciplinary Study of Symmetry, Porto, Portugal, 11-16 Julho 2022 (**Member of the Scientific Committee**).
4. Fausto, R., VIII Encontro Nacional dos Estudantes de Química – VIII ENEQUI, Coimbra, Portugal, 8-10 Abril 2022 (**Member of the Scientific Committee**).
5. Fausto, R., XVI International Congresso on Molecular Spectroscopy, Szczarwnica, Polónia, 11-14 Setembro 2022. (**Member of the International Advising Committee**)
6. Fausto, R., International Conference on Materials Science, Engineering & Technology, Dubai, EAU, 13-15 Dezembro 2022 (**Member of the Scientific Committee**).
7. Braz, S., VIII Encontro Nacional de Estudantes de Química – VIII ENEQUI, Coimbra, Portugal, 8-10 Abril 2022 (**Member of the Organizing Committee**).
8. Braz, S., EuChemS 2022, Lisboa, Portugal, 28 Agosto - 1 Setembro 2022 (**Member of the Local Organizing Committee**).
9. Nunes, C. M., VIII Encontro Científico do NEQ / AAC, Coimbra, Portugal, 15-17 Novembro 2022 (**Member of the Scientific Committee**).
10. Carvalho, M., EuChemS 2022, Lisboa, Portugal, 28 Agosto - 1 Setembro 2022 (**Member of the Local Organizing Committee**).
11. Costa, E., Membro da organização da 5.<sup>a</sup> Edição do Curso Pós-Graduado de Actualização de Ciências em Animais de Laboratório Categoria B, Faculdade de Farmácia da Universidade de Lisboa, Lisboa, 2022. **Member of Organizing Committee**
12. Burke, A. J., XIV National Organic Chemistry Meeting (14ENQO) and the 7th National Medicinal Chemistry Meeting (7ENQT), Caparica 20-22 April 2022 (**Member of the Scientific Committee**).
13. Burke, A. J., XXII International Symposium on Homogeneous Catalysis (XXII ISHC), Faculty of Sciences of the University of Lisbon, 24-29 July 2022, (**Member of the Scientific Committee**).
14. Valente, A. J. M., 8th International Conference on Bio-based and Biodegradable Polymers (Biopol-2022), Alicante, Spain, 14-16.11.2022 (**Member of the Scientific Committee**).
15. Campos, M.G., Scientific Committee BIO HEALTH CONGRESS. February 24-27, 2022. (<https://www.biohealthcongress.com>) (**Member of the Scientific Committee**) – online
16. Campos, M.G., 6th International Symposium on Phytochemicals in Medicine and Food August 5-10, 2022, Hangzhou, China. <https://529324562.wixsite.com/6-ispmf/committee> (**Member of the Scientific Committee**) – online
17. Campos, M.G., 1st European Symposium on Phytochemicals in Medicine and Food (1-EuSPMF), September 7-9, 2022. Belgrado, Serbia – **Co-Chairman** | <https://1euspmpf.rs/> (**Member of the Organizing Committee**).



18. Campos, M.G., XVI Encontro de Química dos Alimentos. Instituto Politécnico de Castelo Branco, Outubro, 2022 (**Member of the Scientific Committee**)
19. Costa, E., *Experimentação Animal e Alternativas*. II Congresso Científico de Estudantes de Saúde, Porto, 2022. **Workshop Coordinator**
20. Costa, E., *Animal Experimentation*. XI In4Med, Coimbra, 2022. **Workshop Coordinator**
21. Loura, L. M. S., A one-day symposium on the occasion of the 60 years of Mário N. Berberan e Santos, 1<sup>st</sup> July 2022 (**Member of the Organizing Committee**)
22. Moreno, M. J., BiTap - Biosystems in Toxicology and Pharmacology – Current Challenges, Online Meeting, 8-9 September 2022 (**Member of the Organizing and Scientific Committees**)
23. Moreno, M. J., 8<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress, Bilbao, 20-21 June 2022 (**Member of the Scientific Committee**)
24. Moreno, M. J., VIII ENEQUI, Coimbra 8-10 Abril 2022 (**Member of the Scientific Committee**)
25. Moreno, M. J., VIII Encontro Científico NEQ/AAC, Coimbra 15-17 Novembro 2022 (**Member of the Scientific Committee**)
26. Salvador, A. 8th International Iberian Biophysics Congress, Bilbao (Spain), 20-21 June 2022 (**Member of the Organizing and Scientific Committees**)

## Thesis (84)

### PhD Thesis (16)

1. Bruno Ekawa “*Estudo termoanalítico e caracterização de coamorfos e complexos de lantanídeos com valsartana*”, Tese de Doutoramento, UNESP- Universidade Estadual Paulista “Júlio Mesquita Filho”, 2022. [Orientação: Caires, F. J., Eusébio, M. E. S.]
2. João Bernardo de Albuquerque Gonçalves Bothelho Nogueira “*Generation and Characterization of Novel Materials Exhibiting Color Polymorphism*”, Tese de Doutoramento em Química, Universidade de Coimbra. 2022. [Orientação: Fausto, R.; Castiglioni, C.]
3. Cátia Filipa Sousa Marques “*Toxicological and Mechanistic Evaluation Behind Montelukast Repurposing: Metabolomic and Proteomic Approaches*”, Tese de Doutoramento, University of Coimbra. 2022. FCT Medicinal Chemistry Program [Co-Orientação: Arnaut, L. G.]
4. Piotr Gierlich “*Covalently cross-linked tetrafunctionalized m-THPC chitosan hydrogels as drug delivery platforms*”, Tese de Doutoramento, University of Coimbra and Trinity College of Dublin. POLYTHEA – Innovative Training network – Joint Doctorate. Orientação: Lígia C. Gomes-da-Silva e Mathias O. Senge
5. Claire Donohoe “*Unravelling the pivotal role of atropisomerism for cellular internalization*”, Tese de Doutoramento, University of Coimbra and Trinity College of Dublin. POLYTHEA – Innovative Training network – Joint Doctorate. Orientação: Lígia C. Gomes-da-Silva e Mathias O. Senge
6. Harry Charles Sample “*On the Utilization of geminal-Dimethyl Hydroporphyrins and Tetraphenylethylenes in Photodynamic Therapy*”, Tese de Doutoramento, University of Coimbra and Trinity College of Dublin. POLYTHEA – Innovative Training network – Joint Doctorate. Orientação: Mathias O. Senge and Lígia C. Gomes-da-Silva
7. Rafael T. Aroso, *Computational design and synthesis of molecules for application in antimicrobial therapies*, Tese de doutoramento em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022 [Orientação: Pereira, M. M., Calvete, M. J. F.]
8. Nélia Cristina Tadeu Tavares, *Síntese de ligandos e catalisadores quirais para transformações assimétricas*”, Tese de Doutoramento, University of Coimbra. 2022. FCT CATSUS Program [Orientação: Serra, M. E. S., Murinho, D., Ferreira, M. J.]
9. Pedro Manuel da Costa Gomes Brandão “*Sustainable asymmetric catalytic synthesis of novel oxindole hybrids with potential biological activity*”. Tese de Doutoramento, University of Coimbra. 2022. Programa Doutoral CATSUS [Orientação: Pineiro, M.; Burke, A.; e Maxim L. Kuznetsov, M. L.]  
Distinguida com o **Prémio FISIOCAT para a melhor Tese de Doutoramento em Catálise** em 2022 pela Divisão de Catálise e Materiais Porosos da Sociedade Portuguesa de Química
10. João Pedro Caria Vareda, “*Environmental cleaning and recovery of heavy metals via functionalization of silica aerogels*”, Tese de Doutoramento, University of Coimbra, 2022. [Orientação: Luísa Durães, L., Valente, A. J. M.]
11. Cátia Filipa Oliveira Correia “*Pontos de carbono: da síntese às aplicações*”, Tese de Doutoramento, IST, University of Lisbon. 2022. FCT “ChemMat - Materials Chemistry of nanostructured materials with optic electric and magnetic functionalities” Program [Orientação: Martinho, J. M. G., Maçôas, E., Marques, J. M. C.]

12. Maria Mendes “Hybrid nanoparticles as multifunctional platform for brain tumor therapy” Tese de Doutoramento. Universidade de Coimbra. 2022. Doutoramento em Ciências Farmaceuticas.  
[Orientação: Vitorino, C., Pais, A.]
13. Margarida Miranda “Topical bioequivalence: experimental and regulatory considerations” Tese de Doutoramento. Universidade de Coimbra. 2022. Doutoramento em Ciências Farmaceuticas.  
[Orientação: Vitorino, C.]
14. Ivy L. Librando, *Synthesis of High Added-Value Products Using Hybrid Catalysts and Microwave Irradiation*, Doutoramento em Química, IST - Universidade de Lisboa, 2022  
[Co-orientação: Geraldes, C.F.G.C.]
15. José Pedro Silva, *Ultra - high resolution structure determination of cobalt-substituted human carbonic anhydrase 2 – inhibitor complexes*, Doutoramento em Química, Universidade Nova de Lisboa, 2022.  
[Orientação: Geraldes, C.F.G.C.]
16. João Pedro dos Reis Luís, *Targeting Neuroinflammation – from target validation to rational design of selective modulatos*, Doutoramento em Química, Universidade de Coimbra, 2022  
[Orientação: Rui M. M. Brito]

## MSc Thesis (27)

1. Diogo Martins Barradas, *Investigação de formas sólidas multicomponente do antimalárico artesunato: uma aproximação experimental e computacional*, Mestrado em Química, Departamento de Química, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: Eusébio, M. E. S., Rosado, JM.T.S.]

2. Inês Margarida Rodrigues Morgado, *Investigação de polimorfismo e de formas sólidas multicomponente da delafloxacin, uma fluoroquinolona de quarta geração*, Mestrado em Química, Departamento de Química, Universidade de Coimbra, 2022

[Orientação: Eusébio, M. E. S., Canotilho, J.]

3. Pedro Nuno Sousa Leite da Silva, *Investigation on iguratimode: solid forms and lipid interaction and permeation*, Mestrado em Química Medicinal, Departamento de Química, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: Maria, T. M. R., Canotilho, J.]

4. Gil Almeida Ferreira “*Estudo de Nitrilimas em Matrizes Criogénicas: Geração, Caracterização, e Reactividade por Excitação Electrónica e Vibrational*”, Tese de Mestrado em Química, Universidade de Coimbra. 2022.

[Orientação: Nunes, C. M., Fausto, R.]

5. Anita da Silva Amorim. *Terapia Fotodinâmica Antimicrobiana*, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: L. G. Arnaut]

6. Bruna Coutinho. *Autofluorescência no azul profundo enquanto marcador de formação de beta-amilóides*, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022. [Orientação: C. Serpa]

7. Andreia C. Tuna. *Interaction between Albumins and Clinically Approved HIV-Transcriptase Reverse Inhibitors*, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022. [Orientação: C. Serpa, Otávio A. Chaves]

8. Carina Santos Pedrosa, *Otimização de Métodos de Monitorização do Processo de Injeção na Indústria de Plásticos*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2022. [Orientação: C. Serpa, Jorge Costa Pereira and Raquel Brejeiro]

9. Amisse Milange, *Avaliação de corantes para células solares*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2022. [Orientação: C. Serpa]

10. Luís Rodrigues. “*Evaluation of oxidative stress after photodynamic therapy with photosensitizers of varied lipophilicities*”, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: Lígia C. Gomes-da-Silva]

11. Carolina Melo, “*NIR-light activable gene therapy*”, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: Lígia C. Gomes-da-Silva]

12. Gustavo Teixeira Barandas. *Caracterização molecular de tumores de mama induzidos por 7,12-Dimetilbenzantraceno num modelo experimental*, Mestrado em Patologia Experimental, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: Costa, E.]

13. Carolina Ferreira Simões. *Efeitos de agentes antidiabéticos em marcadores vasculares e inflamatórios em indivíduos com Diabetes Mellitus Tipo 2: Revisão sistemática e meta-análise*, Mestrado em Farmacologia Aplicada, Universidade de Coimbra, 2022.

[Co-Orientação: Costa, E.]

14. Diana Lourenço Marques, *Development of oxidative catalytic processes in continuous flow chemistry for drug degradation*, Tese de mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2022

[Orientação: Calvete, M. J. F., Rodrigues, F. M. S.]

15. Iuri Afonso Tavares, *Transformation of Natural Products for the Development of Bioplasticizers and Photosensitive Materials*, Tese de mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2022

[Orientação: Pereira, M. M., Calvete, M. J. F.]

16. Madalena Figueiredo Cunha e Silva, *Desenvolvimento de Potenciais Agentes Antibacterianos através de Estratégias Sintéticas Sustentáveis*, Tese de mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022

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

17. Vitaliy Masliy, *Sustainable Synthesis of Natural-Based Potential Fragrances via Flow Chemistry*, Tese de mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2022

[Orientação: Pereira, M. M., Rodrigues, F. M. S.]

18. Daniela Sofia de Sousa Teixeira, *Desenvolvimento de Agentes de Contraste Fluorados para Imagiologia por MRI <sup>19</sup>F e PET*, Tese de mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: Pinto, S. M. A.]

19. Francisca Dias Pereira, *Estudo da síntese de derivados do 5-clorometilfurfural*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: Serra, M. E. S., Serra, A. C.]

20. Pedro Miguel Cruz Matias, *Síntese de Polímeros Orgânicos Porosos (POPs) para Aplicação em Catálise e Adsorção de Poluentes*, Universidade de Coimbra, 2022.

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

21. João Pedro Mendes Ferreira, *Síntese e caracterização fotofísica de sensores baseados em ligandos tripodais para deteção de cátions metálicos*, Mestrado em Química Avançada e Industrial variante Química-Física Experimental e Teórica, Universidade de Coimbra 2022

Orientação: Delgado-Pinar, E., Seixas de Melo, J. S.]

22. Maria Beatriz Baltazar Alves, *Terapias avançadas para o glioblastoma*, Mestrado em Biotecnologia, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: Vitorino, C., Ventura F.]

23. Marina Reva, *Boron neutron capture therapy: an emergent treatment modality in glioblastoma*, Mestrado integrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: Vitorino, C.]

24. Mariana Silva Neves, *Physiologically-based pharmacokinetic modeling to support determination of drug product bioequivalence: scientific and regulatory consideration*, Mestrado integrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: Vitorino, C.]

25. Rafaela Mateus, *Nanosponges: concept, synthesis, and application in Oncology*, Mestrado integrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: Vitorino, C.]

26. Margarida Cordeiro, *Permeation of weak acids and bases through lipid bilayers – modelling and validation of a pH variation assay*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: Moreno, M. J., Salvador, A.]

27. Julia Laurent, *Biophysical characterization of  $\beta$ -Cyclodextrins-membrane interaction for application in drug and gene delivery*, Chemical Engineer's degree (equivalente ao Mestrado em Química), University of Mulhouse, France, 2022.

[Orientação: Moreno, M. J., Josien D.]

## BSc Thesis (41)

1. Tiago Alexandre Pereira Figueiredo, *Investigação da formação de co-cristais de ibuprofeno com aminoácidos (L-prolina, L-histidina, L-triptofano)*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2022.  
[Orientação: Maria, T. M. R.]
2. Lara Bitto Martins, *Investigação de formas multicomponente do anti-anémico de roxadustate*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2022.  
[Orientação: Eusébio, M. E. S.]
3. Maria Miguel Rocha, *Caraterização e estudo de solubilidade da nabumetona*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2022.  
[Orientação: Castro, R. A. E., Maria, T. M. R.]
4. Luis Miguel Ferreira Pereira, *O papel do diagrama ternário na transposição de escala de um co-cristal farmacêutico*, Monografia, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2022.  
[Orientação: Castro, R. A. E.]
5. Hugo Costa Loureiro, *Perspetiva atual e futura da doença de Parkinson e possíveis benefícios da terapêutica antioxidante*, Monografia, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2022.  
[Orientação: Castro, R. A. E.]
6. Gabriela Silva Marto, *Cocristais de duplo ativo farmacêutico*, Monografia, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2022.  
[Orientação: Castro, R. A. E.]
7. Diana Sofia Azevedo Alves, *Avanços na Imunoterapia na prevenção e tratamento da Diabetes Mellitus tipo I*, Monografia, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2022.  
[Orientação: Castro, R. A. E.]
8. Mateus Isento Martins, *Epilepsia canina: contributo dos dispositivos médicos*, Monografia, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2022.
9. Gisela Ferreira Pinheiro, *O papel do farmacêutico no acompanhamento de doentes portadores de um cardioversor desfibrilhador Implantável*, Monografia, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2022.
10. Carlota Isabel Lourenço Simão Álvaro, *Leishmaniose canina: sintomas e tratamentos*, Monografia, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2022.
11. Gregory Ferreira, *Breaking and Forming of Intramolecular Hydrogen Bond in Dihydroxybenzaldehyde by Conformational Change in Low-temperature Matrix*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2022  
[Orientação: Fausto, R.; Srinivas, D.]
12. Catarina A. Montargil, *Classificação de Leites Usando Espetroscopia de Infravermelho com Transformada de Fourier em Refletância Total Atenuada (ATR-FTIR) e Espetroscopia de Raman Associadas a Análise de Componentes Principais (PCA)*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022  
[Orientação: Fausto, R.; Brito, A. L. B.]
13. Marília Santos Marques, *Produção de materiais para permeabilização de membranas biológicas*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022.  
[Orientação: L. G. Arnaut]
14. Joel Sérgio Jesus Barcelos, *Entrega transdérmica de um precursor da vitamina C assistida por ondas fotoacústicas e por iontoforese*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: L. G. Arnaut]

15. João P. Campos. *Development of pharmaceutical formulation for the delivery of LUZ51B and photochemical characterization*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: F. A. Schaberle. L. G. Arnaut]

16. João L. F. Barreto. *Photoacoustic study of nanodroplet-loaded porphyrins*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: L. G. Arnaut]

17. Patrícia Cai Lin. *Homology Modeling of HIV-2 Protease as a Simple and Feasible Approach to Demonstrate the Relationships between Structure and Function in Chemical-Biology Classes*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022. [Orientação: C. Serpa, Otávio A. Chaves]

18. Lara Mingatos. *Mecanismos de penetração na pele induzidos por ondas fotoacústicas de alta frequência*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022. [Orientação: C. Serpa]

19. Sabina Teixeira, *Mechanisms of cell death triggered by photodynamic therapy with LUZ51b*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022. [Orientação: Lígia C. Gomes-da-Silva]

20. Mariana Silva, *Impact of tocopherol on photodynamic therapy with LUZ51b: the importance of the experimental design*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022. [Orientação: Lígia C. Gomes-da-Silva]

21. Joana Santos, *Evaluation of Cell Viability When Irradiated With Different Fluence Rate*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022. [Orientação: Fábio A. Schaberle]

22. Beatriz Almeida Melo, *Síntese de derivados do 5-clorometilfurfural para aplicação como marcadores de combustível*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: Serra, M. E. S.]

23. Pedro G. S. Gonçalves Miranda, *Síntese de monómeros polifuncionais para a preparação de estruturas orgânicas covalentes (cof). Aplicação em reações de catálise heterogénea*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: Murtinho, D.]

24. Joana Duarte, *Síntese sustentável de fármacos utilizando reações multicomponentes*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: Pineiro, M.]

25. Diogo André dos Reis Torres Veiga, *Síntese de novos BODIPYs por via de reações com nitrosoalquenos: Desenvolvimento de agentes de imagem de fluorescência*, Diogo André dos Reis Torres Veiga, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D.; Lopes, S. M. M.]

26. Ana Teresa Santos, *Síntese de novos BODIPYs por via de reações com azoalquenos: Desenvolvimento de agentes de imagem de fluorescência*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D.; Lopes, S. M. M.]

27. Luísa Sousa Guerreiro, *Síntese de novas espiro- $\beta$ -lactamas com atividade antimicrobiana: estudo de condições de reação em fluxo contínuo*, Luísa Sousa Guerreiro, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D.; Tutor: Alves, A.]

28. Pedro Miguel Mota Sá, *Síntese de novas espiro- $\beta$ -lactamas com atividade antimicrobiana: estudo de condições de reação em fluxo contínuo*, Pedro Miguel Mota Sá, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022.

[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D.; Tutor: Alves, A.]

29. Rodrigo Luz, “Ciclizações (3+2) de alenos com heterociclos catalisadas por fosfinas”. Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2022.  
[Orientação: Cardoso, A. L.]
30. Patrícia Figueiredo, *Estudo dos coeficientes de difusão do 1,2,3,4-tetra-hidronaftaleno em metanol*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2022.  
[Orientação: Santos C.I.A.V., Barros M.C.F.]
31. Ana Rita Alexandre Ramos, *Difusão em materiais poliméricos de aplicação industrial - Estudo da difusão de álcoois na borracha VMQ*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2022.  
[Orientação: Santos C.I.A.V., Barros M.C.F.]
32. Rodrigo do Carmo Santos, *Estrutura e termodinâmica de nanopartículas de zinco e cádmio*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2022.  
[Orientação: Marques, J. M. C.]
33. Maria da Graça Rodrigues, *Utilização de Dinâmica Molecular para investigação da interação de pesticidas com proteínas*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022.  
[Orientação: Abreu, P. E., Marques, J. M. C.]
34. Ana Catarina Gonçalves Fernandes, *Difusão do 5-fluorouracil com diferentes transportadores:  $\beta$ -ciclodextrina e Dodecilsulfato de sódio*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022.  
[Orientação: A.C.F. Ribeiro]
35. Luana Domingues Fonseca, *Determinação da dureza e iões cálcio em aquíferos cársicos*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022. [Orientação: A.C.F. Ribeiro]
36. António Emanuel Costa, *Microscopia de fluorescência temporalmente resolvida (FLIM) aplicada ao estudo da 7-heptadecil-4-hidroximarina em ambientes micelares*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2021.  
[Orientação: Costa, T., Seixas de Melo, J. S.]
37. Francisco Fonseca, *Caracterização de moléculas antibacterianas através de cálculos de estrutura eletrónica e métodos de aprendizagem computacional*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2022.  
[Orientação: Nunes, S.C.C., Cova, T.F.]
38. Ana Duarte, *Simulações de Monte Carlo de nanosistemas para entrega genética contendo ácido hialurónico*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2022.  
[Orientação: Nunes, S.C.C., Pais, A.A.C.C.]
39. Rafael Ribeiro Neves, “*Estudo Teórico do Sistema CO<sub>2</sub>*”, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2022 (supervisor, 18 valores).
40. Maria João Sousa, “*Ciência de dados e Machine Learning para análise e previsão de dados biomédicos*”, Licenciatura em Engenharia Biomédica-Bioelectrónica, ISEC-IPC, 2022 (co-supervisor, 19 valores).
41. Rodrigo Ramos Marques, “*Machine Learning aplicado a problemas biomédicos*”, Licenciatura em Engenharia Biomédica-Bioelectrónica, ISEC-IPC, 2022 (co-supervisor, 19 valores).



## Technical Reports (2)

1. Caridade, Pedro J. S. B., “CITIES2030: S2CP design and reference architecture”, Cities2030 consortium under the supervision of the project’s coordinator (2022, avaliação do painel da Comissão Europeia).
2. Caridade, Pedro J. S. B., “CITIES2030: Data sources and integration report”, Cities2030 consortium under the supervision of the project’s coordinator (2022, avaliação do painel da Comissão Europeia).

## Lab Prototypes\_ Software (3)

1. Caridade, Pedro J. S. B., *Air pollution quantification based on satellite imagery netcdf format (big data approaches)* (2020–, GNU2 licence).  
<https://github.com/pcaridade/cams>
2. Caridade, Pedro J. S. B., *CHIPR PES: Optimised toolbox for fitting potential energy surface* (2020–, GPL licence).  
<https://github.com/pcaridade/chipr>, v.1.2
3. Caridade, Pedro J. S. B., *Ψbuntu: Quantum Chemistry Tailored Live Linux OS for Computational Chemistry Classes based on Ubuntu MATE 20.04 LTS* (2020–, GNU2 licence, <https://github.com/pcaridade/psibuntu> v.1.0).

## Patents (12)

1. *Devices and methods for priming solid tumors with pressure pulses to enhance anticancer therapies.*  
Inventores: L. G. Arnaut Moreira, Maria Inês P. Mendes, Diogo A. C. F. Pereira, Carlos A. L. Serpa Soares, Celso M. F. P. João, João P. F. B. C. Santos, Universidade de Coimbra e LaserLeap Technologies SA  
USA patent application no. 17892355. 22/08/2022.
2. *Methods and apparatuses for contactless amplification of pressure pulses to yield high pressures inside materials*  
Inventores: L. G. Arnaut Moreira, Carlos A. L. Serpa Soares, Fábio A. Schaberle  
PT patent application no. 20221000002122. 20/05/2022
3. *Método de produção de papéis tissue através do revestimento de biopolímeros na etapa de transformação de um papel tissue num produto acabado.*  
Inventores: A. C. S. Ferreira, R. J. A. Garcia, D. M. B. Murinho, A. J. M. Valente, A. M. M. S. Carta, R. A. C. Bértolo, P. C. O. R. Pinto.  
Pedido provisório Patente Portuguesa 20221000001026 (2022/02/28-10:16:06)
4. *Método de revestimento de material celulósico com óleos essenciais.*  
Inventores: R. J. A. Garcia, A. C. S. Ferreira, D. M. B. Murinho, A. J. M. Valente, A. F. M. Lourenço.  
Pedido provisório Patente Portuguesa 20221000001470 (2022/03/31-14:50:26)
5. *Complexos poliméricos de lantanídeos luminescentes e matrizes de fibras celulósicas funcionalizadas para deteção de contrafação.*  
Inventores: A. J. M. Valente, A. A. C. C. Pais, D. M. B. Murinho, A. F. Y. Matsushita, M. P. R. T. Faro.  
Patente portuguesa concedida em 2022.05.04, PT 116147B, WO2021176340A1.
6. *Método de obtenção de betainato de amido.*  
Inventores: A.J.M. Valente, P.J.T. Ferreira, D.M.B. Murinho, R.J. A. Garcia, M. Sharma, A.F.M. Lourenço.  
PCT/IB2022/051030 (submission number 051030, 07 February 2022)

7. *Extracción o separación selectiva de fenoles com polímeros que comprenden grupos borónicos*

Inventores: José Carlos GUIRADO MORENO, José Miguel GARCÍA PÉREZ, Saúl VALLEJOS CALZADA, Lara GONZÁLEZ CEBALLOS, María Teresa SANCHO ORTIZ, Miguel Angel FERNÁNDEZ MUIÑO, Sandra María OSÉS GÓMEZ, Gianluca UTZERI, Artur VALENTE.  
Pending Patent (ES), P202230376, 26 abril 2022, 12:30 (CEST)

8. *Formulações para tratamento de superfície de substratos celulósicos à base de hidrocloreto de betaina*

Inventores: Paulo Jorge Tavares Ferreira, Artur José Monteiro Valente, Mohit Sharma, Ana Filipa Martins Lourenço.  
Pending Patent (PT), 20221000002940, 2022/07/28-17:09:49

9. *Intranasal administration for a sustained brain delivery of highly protein-bound drugs*

Inventores: Ana Fortuna, Amílcar Falcão, Carla Vitorino, Joana Bicker, Tânia Silva, Carla Fonseca.  
Pending Patent (PT), 20221000000822

10. *Topical composition and uses thereof*

Inventores: Maria Cruz, Gonçalo Brites, Isabel do Vale, Ana Silva, Carla Vitorino, Margarida Gonçalo, Bruno Neves  
Pending Patent (PT), 2022100000277

11. *Hybrid nanoparticles as multifunctional platform for brain tumor therapy*

Inventores: Maria Mendes, José Sereno, Miguel Castelo-Branco, Maria António, Ana Luísa Silva, João Sousa, Alberto Pais, Carla Vitorino  
Pending Patent (PT), n.º 118248 (2022/12/13)

12. *2-oxothiazolidin-4-one derivatives active as transthyretin ligands and uses thereof.*

Authors: Pontes Meireles Ferreira de Brito, Rui Manuel; Vieira Simões, Carlos José; Vasconcelos Dias de Pinho e Melo, Teresa Margarida; Victor, Bruno Lourenço da Silva; Lourenço de Almeida, Zaida Catarina; Lopes, Ana Lúcia Cabral Cardoso; Nascimento, Bruno Filipe Oliveira.  
European Patent N° EP4029859. 2022-07-20

## Conferences Proceedings (29)

### Articles in International Peer-Reviewed Conferences Proceedings

1. Rodrigues, S. P. J., Garcia, T. M. O., Pérez-Parallé, M. L., *Non-formal Education Outside Buildings: The Case of Shore Chemistry*. In Proceedings of the 11th International Conference the Future of Education, Firenze: Filodiritto, pp. 318-321, 2021.  
ISBN: 979-12-80225-23-8  
DOI: 10.26352/F701\_2384-9509
2. Campos, M.G., Lokutova, O., Anjos, A., *Therapeutic Potential of Pollen*. In Proceedings of IcBees. 16-18 June, Turkey, 2022.
3. Anjos, A., Hongliang, L., Campos, M.G, *Bee pollen as a healthy food and food ingrediente -* . In Proceedings of IcBees, 16-18 June, Turkey, 2022.
4. Vilas-Boas, M., Anjos, O., Campos, M.G., Russo-Almeida, P., Falcão, S., *Establishing Standards to Strengthen the International Trade of Bee Products*, In Proceedings of IcBees, 16-18 June, Turkey, 2022.
5. Campos, M.G., *Drug-Herb Interactions as a cause of therapeutic failure or toxic events: Oncology examples of Case Reports*, in Proceedings of I-EuSPMF Conference, 7-9 Sep, Belgrade- Serbia, 2022.
6. Sérgio P. J. Rodrigues. *Ethanol in class and at home: guided inquiry-based learning* In 8th International Conference on Higher Education Advances (HEAd'22), Valencia, 2022, pp. 215-221.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.4995/head22.2022.14411>
7. Sérgio P. J. Rodrigues. *Using Normalized Opinions Obtained from Interactive Online Feedback to Stimulate Critical Thinking and Reinforce Learning* in 12th International Conference The Future of Education, 2022, pp. 174-177.  
DOI: [http://dx.doi.org/10.26352/G630\\_2384-9509](http://dx.doi.org/10.26352/G630_2384-9509)

### Articles in National Peer-Reviewed Conferences Proceedings

1. Paula, V., Pedro, S., Campos, M.G., Delgado, T., Estevinho, L., Anjos, O., *Bioatividade de flores de Acacia dealbata L. com potencial terapêutico*. In Proceedings of III Colóquio Nacional de Plantas Aromáticas e Mediciniais (CNPAM2022), Castelo Branco, 24 a 26 de março, 2022. Abstract pp 56
2. Anjos, O., Campos, M.G., Lavado, I., Russo-Almeida, P., Vilas Boas, M., *Avanços na normalização do pólen Apícola*, in Proceedings of III Colóquio Nacional de Plantas Aromáticas e Mediciniais, 24 a 26 de março de 2022, Castelo Branco, Abstrat pp54-55.
3. Campos, M.G., *Food-Drug Interactions: What we should know*, in Proceedings of XVI Encontro de Química dos Alimentos, Instituto Politécnico de Castelo Branco, Outubro 2022.
4. Sérgio P. J. Rodrigues. *Aprendizagem das ciências baseada em projetos envolvendo livros e obras literárias*. In “Atas do 9.º Congresso Olhares Sobre a Educação / 2<sup>nd</sup> International Congress Perspectives on Education.” FIGUEIREDO, Maria; SILVA, Ana Isabel; ROCHA, João; MELO, Ana; CARDOSO, Ana Paula; RIBEIRO, António; GOMES, Helena; MENEZES, Luís; FELIZARDO, Sara (eds.) Viseu: Instituto Politécnico de Viseu. 2022, pp. 82-88.

## Articles in International Peer-Reviewed Conferences Proceedings

1. Encarnação, T., Mateus, A., Gaspar, F., Massano, A., Biscaia, S., Guincho, P. B., Nogueira, B. A., Castro, R. A. E., Archer de Carvalho, T., Eusébio, M. E. S., Fausto, R., Sobral, A. J. F. N., *Bioremediation Using Microalgae and Circular Economy Approach: A Case Study*, *Mater. Proc.*, 8, pp. 108-109, 2022.  
DOI: 10.3390/materproc2022008108

1. C. Serpa, D. A. Pereira, T. B. Pinto, A. D. Silva, L. G. Arnaut, *Generation and applications of broadband high-frequency laser ultrasound based on nanostructured materials*, *Proc. SPIE*, 11960, 1196015, 2022.  
DOI: 10.1117/12.2609744

3. L. G. Arnaut, C. S. Lobo, M. I. P. Mendes, D. A. Pereira, *Photoacoustic delivery and imaging methods in PDT*. *Proc. SPIE*, 11940, 119400A. 2022.  
DOI: 10.1117/12.2609789

4. Pereira, F., Lourenço, A., Aires-de-Sousa, J., Ferreira, L. M., Marques, M. M. B., Sousa, E., Branco, P.S., *14th Edition of the Nacional Organic Chemistry Meeting and 7th Edition of the Nacional Therapeutic Chemistry Meeting*. *Chem. Proc.* 11, 1, 2022. <https://doi.org/10.3390/chemproc2022011001>

5. Alves, A. J. S., Bártole, I., Taveira, N., Pinho e Melo, T. M. V. D., *New Chiral Spiro- $\beta$ -Lactams via [3 + 2] Annulation of Allenates with 6-Alkylidenepenicillanates: Synthesis and Anti-HIV Activity*, *Chem. Proc.*, 11, pp 18-19, 2022.  
DOI: 10.3390/chemproc2022011001

6. Alves, C. C., Cardoso, A. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Synthesis of Chiral 2-(Tetrazol-5-yl)-2H-Azirines: An Approach to Molecules with Relevance in Medicinal Chemistry*, *Chem. Proc.*, 11, pp 26-27, 2022.  
DOI: 10.3390/chemproc2022011001

7. Cardoso, A. L., Paixão, J. A., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Bis-Furans: A Sustainable Source of Structurally Diverse Scaffolds*, *Chem. Proc.*, 11, pp 28-28, 2022.  
DOI: 10.3390/chemproc2022011001

8. Soares, M. I. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Synthesis of Chromeno-Fused Systems via Lewis Base-Dependent [3 + 2] or [3 + 3] Annulation Reactions of Allenic Esters and 3-Nitro-2H-Chromenes*, *Chem. Proc.*, 11, pp 52-53, 2022.  
DOI: 10.3390/chemproc2022011001

9. Costa, B. D. P., Braz, J., Lopes, S. M. M., Laranjo, Rodrigues, A. C. B., Piñeiro, P., Seixas de Melo, J. S., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Trans-A<sub>2</sub>B-Corroles Containing a Hydrazone Moiety: A New Class of Photosensitizers for Photodynamic Therapy of Lung Cancer*, *Chem. Proc.*, 11, pp 75-76, 2022.  
DOI: 10.3390/chemproc2022011001

10. Lopes, S. M. M., Benzi, A., Nunes, S. C. C., Pais, A. A. C. C., Tavani, C., Petrillo, G., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Reactivity of Ethyl Nitrosoacrylate toward Pyrrole, Indole and Pyrrolo[3,2-c]carbazole: Na Experimental and Theoretical Study*, *Chem. Proc.*, 11, pp 80-81, 2022.  
DOI: 10.3390/chemproc2022011001

11. Braz, J., Costa, B. D. P., Lopes, S. M. M., Laranjo, M., Piñeiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *trans-A<sub>2</sub>B-Corroles Containing an Oxime Moiety: Novel Photosensitizers for Photodynamic Therapy of Lung Cancer*, *Chem. Proc.*, 11, pp 82-83, 2022.  
DOI: 10.3390/chemproc2022011001

12. Grosso, C., Sase, T. J., Alves, N. G., Lemos, A., Cardoso, A. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Exploring the Reactivity of Tetrazolyl-2H-Azirines toward Arynes: Selective Synthesis of Indole Derivatives*, *Chem. Proc.*, 11, pp 83-84, 2022.  
DOI: 10.3390/chemproc2022011001

13. Ribeiro, J. L. P., Lopes, S. M. M., Saraiva, L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Novel  $\beta$ -Carboline Derivatives as Potential Anticancer Agents*, João L. P. Ribeiro, Susana M.M. Lopes, Lucília Saraiva, Teresa M.V.D. Pinho e

Melo, *Chem. Proc.*, 11, pp 89-90, 2022.

DOI: 10.3390/chemproc2022011001

14. Hendrikx, M. M., Ribeiro, J. L. P., Soares, M. I. L., Saraiva, L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Chiral 6,7-Bis(hydroxymethyl)-1H,3H-Pyrrolo[1,2-c]thiazoles as Novel p53-Activating Agents to Improve Colorectal Cancer Targeted Therapy*, *Chem. Proc.*, 11, pp 91, 2022.

DOI: 10.3390/chemproc2022011001

15. Mata, A. I., Pereira, N. A. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Silva, L. C. G., Simões, C. J. V., Brito, R. M. M., *Targeted Photodynamic Therapy: New Photosensitizers That “Click”*, *Chem. Proc.*, 11, pp 126-127, 2022.

DOI: 10.3390/chemproc2022011001

16. Encarnação, T., Mateus, A., Gaspar, F., Santinha, D., Massano, A., Sara Biscaia, S., Guincho, P. B., Nogueira, B. A., Castro, R. E. A., Carvalho, T.A., Fausto, R., Sobral, A. J. F. N., *Microalgae biorefinery: high-value products from bioremediation processes, RESIM - International Conference on Advanced Research on Sustainable Intelligent Manufacturing RESIM Proceedings*, Politécnico de Leiria, Leiria, Portugal, 2 a 3 de junho de 2022.

17. Coelho, C. D. F.; Jesus, J. A.; Vaz, D. C.; Lagoa, R.; Moreno, M. J. *BSA-PEG Hydrogel: A Novel Protein-Ligand Binding 3D Matrix*, *Medical Sciences Forum*, 11(1), 1, 2022.

DOI:10.3390/BiTaP-12878

18. Pires, C. L.; Nascimento, S. F.; Rodrigues, E. T.; Godinho, L. P.; Churro, C.; Pardal, M. A.; Moreno, M. J. *Bioavailability and Biotransformation of Paralytic Shellfish Toxins Assessed by Permeability Assays Using Caco-2 Monolayers*, *Medical Sciences Forum*, 11(1), 11, 2022.

Doi:10.3390/BiTaP-12880

## Awards / Distinctions (7)

1. *Exploring the reactivity of tetrazolyl-2H-azirines towards arynes: selective synthesis of indole derivatives*, [Carla Grosso](#), Terver John Sase, Nuno G. Alves, Ana L. Cardoso, Américo Lemos, Teresa M. V. D. Pinho e Melo, 14<sup>th</sup> National Organic Chemistry Meeting (14.º ENQO) e 7<sup>th</sup> National Medicinal Chemistry Meeting (7.º ENQT), Caparica, 20<sup>th</sup>—22<sup>nd</sup> April 2022 - **Prémio de Melhor Poster** (Melhor Comunicação em Painel de Química Orgânica).

2. Pedro Manuel da Costa Gomes Brandão “*Sustainable asymmetric catalytic synthesis of novel oxindole hybrids with potential biological activity*”. Tese de Doutoramento, University of Coimbra. 2022. Programa Doutoral CATSUS

[Orientação: Pineiro, M.; Burke, A.; e Maxim L. Kuznetsov, M. L.]

Distinguida com o **Prémio FISIOCAT para a melhor Tese de Doutoramento em Catálise** em 2022 pela Divisão de Catálise e Materiais Porosos da Sociedade Portuguesa de Química

3. **R2 Value's 2022 Edition, sponsored by NOVA.id.FCT** - “The best pitch” was awarded to team with the technology entitled “Oral Inhaler for The treatment of respiratory Infections caused by RNA Viruses”, which delivers a “new approach to improve your health” [[Inês Bárto](#)lo, Nuno Taveira, Teresa Pinho e Melo, Nuno Alves e Américo Alves]

4. **Prémio do Programa Gilead GÉNESE 2022** - “Spiro- $\beta$ -lactams as broad-spectrum host-directed drugs for RNA respiratory viruses” [[Inês Bárto](#)lo, Nuno Taveira, Teresa Pinho e Melo, Nuno Alves e Américo Alves].

### 5. Prémio Robalo Cordeiro 2022

Cruz, J., Marques, A., Morais, N., Silva, C.G., Oliveira, A., Silva, F., Ribeiro, J., Simões, P., Sargento, A., Burtin, C., Brooks, D. Personalising physical activity in COPD using digital health – optimisation and implementation of the OnTRACK coaching platform. 38º Congresso de Pneumologia, 10 a 12 de novembro. Albufeira, Portugal

### 6. Prémio Tremplin Mariano Gago

Projeto “*Specific contrast agents for biomarkers visualization by magnetic resonance imaging*”, coordenado por Mariette M. Pereira, em parceria com Éva J. Tóth (Centre de Biophysique Moléculaire). Atribuído pelo Ministério Francês do Ensino Superior, Investigação e Inovação, Academia Francesa de Ciências, Ministério Francês da Europa e Negócios Estrangeiros, o Ministério Francês da Cultura, Instituto Camões – Instituto da Cooperação e da Língua e Gabinete Português para a Estratégia, Planeamento e Avaliação Cultural, maio 2022.

### 7. Prémio Semente de Investigação Interdisciplinar - Universidade de Coimbra 2022, na área estratégica Clima, Energia e Mobilidade

Projeto “*CO2BioFilter - Biofilter for Carbon Dioxide Capture and Valorization: A Sustainable Approach towards Environment, Health and Circular Economy*”, coordenado por Rui M. B. Carrilho. Atribuído por Universidade de Coimbra, Instituto de Investigação Interdisciplinar (iiiUC) e Santander Universidades, abril 2022.