



overall output indicators

2023



Overall Output Indicators

2023
by group

	MCF	QM	EMT	QTC	QO	QB	Total*
Books / Book Chapters	21	3	2	2	2	1	30
Articles in International Journals	57	22	29	18	21	20	156
Articles in National Journals	2	-	2	3	1	1	8
Communications at International Meetings	39	25	23	14	20	20	136
Communications at National Meetings	41	26	17	5	18	15	115
Conferences / Seminars Organization	11	5	10	-	2	5	33
Thesis (PhD + MSc + BSc)	39	18	22	7	22	11	113
Reports	-	2	-	2	-	-	4
Lab Prototypes / Software	-	-	-	1	-	-	1
Patents	3	1	-	-	6	2	11
Conferences Proceedings	2	2	2	4	2	2	12
Awards and Distinctions	7	4	1	-	1	3	16

*Adjusted Total, excluding groups collaborations

MCF_ Macromoléculas, Colóides e Fotoquímica Macromolecules, Colloids and Photochemistry
QM_ Química Medicinal Medicinal Chemistry
EMT_ Espectroscopia Molecular e Termodinâmica Molecular Spectroscopy and Thermodynamics
QTC_ Química Teórica e Computacional Theoretical and Computational Chemistry
QO_ Química Orgânica Organic Chemistry
QB_ Química Biológica Biological Chemistry

Contents

	Page
Books and Book Chapters.....	3
Articles in International Peer-Reviewed Journals.....	6
Articles in National Peer-Reviewed Journals.....	24
Communications at International Meetings.....	25
Communications at National Meetings.....	36
Conferences and Seminars Organization.....	45
Thesis Mentorship	47
Technical Reports.....	57
Lab Prototypes / Software.....	57
Patents.....	58
Conferences Proceedings.....	60
Other Publications	62
Awards and Distinctions	63

Books and Book Chapters (30)

1. Asli, H. H., T. Tatrishvili, A.N. Abraham, Haghi, A.K., Sustainable Water Treatment and Ecosystem Protection Strategie, Apple Academic Press, 2023
ISBN: 9781774915189 (impresso)
2. Pogliani, L., Abraham, A.R. Haghi, A.K., Ranjan P., *Nanotechnology-Enhanced Solid Materials: Design, Synthesis, Properties, Applications, and Perspectives*, Apple Academic Press, 2023
ISBN (impresso): 9781774912201
3. Kulkarni, S., Haghi A.K., Manwatkar, S. *Novel Technologies in Biosystems, Biomedical & Drug Delivery*, Ed.I, Springer, 2023
ISBN (impresso): 978-981-99-5280-9. Ed.I, Springer, 2023
DOI: 10.1007/978-981-99-5281-6
4. Kulkarni, S., Kharissov, B.I., Haghi, A.K., Srivastava, V. *Next Generation Materials for Sustainable Engineering*, Ed.I, IGI, 2024.
ISBN (impresso): 979-836--9313-060.
DOI: 10.4018/979-8-3693-1306-0
5. Arranja, C. T., Almeida, C. L. S., Wani, M. Y., Kumar, S., Aqlan, F. M., Sobral, A. J. F. N., Carbon dioxide conversion into propylene carbonate using meso-substituted free-base mad Co(II)metaloporphyrins, Chapter 15 of the Elsevier book “CO₂-philic Polymers, Nanocomposites and Solvents: Capture, Conversion and Industrial Products”, Elsevier, 2023.
ISBN: 978-0-323-85777-2.
6. Encarnação, T., Ramos, P., Mohammed, D., McDonald, J., Lizzul, M., Nicolau, N., Campos, M. G., Sobral, A. J. F. N., Bioremediation Using Microalgae and Cyanobacteria and Biomass Valorisation”, Chapter 2, Springer book “Marine Organisms: A Solution to Environmental Pollution? Uses in Bioremediation and in Biorefinery”, Eds, Encarnação T., Pais.,A.C., Part of the book series: “Environmental Challenges and Solutions” (ECAS), Springer, 2023.
ISBN: 978-3-031-17225-0.
7. Encarnação, T., Campos, M. G., Mateus A., Introduction: Environmental Pollution and Biotechnological Solutions em Marine Organisms: A Solution to Environmental Pollution? Uses in Bioremediation and in Biorefinery. (Eds, Encarnação, T., Pais, A.), Book Series: Environmental Challenges and Solutions. Springer, Introduction, 2023.pp1-4.
ISBN: 978-3-031-17225-0; DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-031-17226-7>
8. Campos, M. G., Bento, C., Gante, J., Leite, A., Interações Planta-Alimento. In Fundamentos de Toxicologia Alimentar, 2023. Eds Dinis, R., Oliveira, N., Carvalho, F., Editora Lidel (Accepted).
9. Rachid, R., Anjos, O. Campos, M. G., Bee, Pollen as a Source of Pharmaceuticals: Where Are We Now? em Pollen Chemistry & Biotechnology, Eds, Bayram, N. E., Kostić, A. Ž., Gercek, Y. C., Springer Nature, 2023, Cap. 15. Pp 319-336.
ISBN 978-3-031-47565-8; DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-031-47563-4>
10. Cunha, C., Sérgio Seixas de Melo, J. The molecules of colour. New structural derivatives from indigo: tryptanthrin and indirubin, em “Photochemistry: Volume 51”, (Ed. S. Crespi e S. Protti, Royal Society of Chemistry (Londres, Reino Unido), 2023, Volume 51, Cap. 3, pp. 45-65.
ISBN (Impresso) 978-1-83767-215-8; eISBN (pdf): 978-1-83767-230-1.
11. Cova, T., Nunes, S., Vitorino, C., Ferreira, M., Rondon-Villarreal, P., Pais, A., In silico approaches for polymeric nanocomposites em “In silico Approaches to Macromolecular Chemistry”, (Ed. M. E. Thomas, J. Thomas, S. Thomas and H. Kornweitz), Elsevier, 2023, Cap. 14, pp. 503-531.
ISBN 978-0-323-90995-2

12. Cova, T. F. G. G., Nunes, S. C.C., Pais, A. A.C.C., Artificial intelligence to speed up active compounds screening, em “New Insights Into Glioblastoma Diagnosis, Therapeutics and Theranostics”, (Ed. C. Vitorino, C. Balaña and C. Cabra), Elsevier, 2023, Cap.13, pp. 271-284.
ISBN 978-0-323-99873-4
13. Mendes, M., Sousa, J., Pais, A. A. C. C., Vitorino, C., Theranostic strategies to potentiate glioblastoma treatment via nanotechnology: The example of gold nanoparticles em “New Insights Into Glioblastoma Diagnosis, Therapeutics and Theranostics”, (Ed. C. Vitorino, C. Balaña and C. Cabral), Elsevier, 2023, Cap.29, pp.707-728.
ISBN 978-0-323-99873-4
14. Pais, A. A. C. C., Encarnação, T., Conclusion: Environmental Protection—Our Common Responsibility em “Marine Organisms: A Solution to Environmental Pollution? Uses in Bioremediation and in Biorefinery”, (Ed. T. Encarnação and A.C. Pais) Springer link, 2023, Cap. 13, pp. 267-269.
ISBN 978-3-031-17228-1
15. Utzeri, G., Murtinho, D., Valente, A. J. M., Introduction to Cyclodextrin-Based Nanosplices, em “Nanosplices for Environmental Remediation”, (ed. S. Gulati) Springer Nature, Switzerland, 2023, pp. 87-116.
https://doi.org/10.1007/978-3-031-41077-2_5
16. New insights into glioblastoma: Diagnosis, Therapeutics and Theranostics, (Ed. Vitorino, C., Balana, C., Cabral, C.) 2023. 1^a edição, Elsevier, Paperback ISBN: 9780323998734, eBook ISBN: 9780323999427
17. Time-proof perspectives on bioequivalence, (Ed. Vitorino, C., Miranda, M., Almeida, A., Sousa, J.J.), Nova Science Publishers, Inc., 2023, ISBN 979-8-88697-604-5, DOI: 10.52305/WKNM2164
18. Vitorino, C., Balaña, C., Cabral, C., Introduction: A brief outlook into glioblastoma diagnosis and therapeutics, em New Insights Into Glioblastoma : Diagnosis, Therapeutics and Theranostics, (Ed. Vitorino, C., Balana, C., Cabral, C.), Elsevier, 2023, Chapter 1, pp. 3-5, Paperback ISBN: 9780323998734; eBook ISBN: 9780323999427, DOI: <https://doi.org/10.1016/C2021-0-00368-0>
19. Basso, J., Fortuna, A., Vitorino, R., Akimitsu, N., Vitorino, C., Non-coding RNAs in glioblastoma at a glance, em New Insights Into Glioblastoma: Diagnosis, Therapeutics and Theranostics, (Ed. Vitorino, C., Balana, C., Cabral, C.), Elsevier, 2023, Chapter 20, pp. 477-504, Paperback ISBN: 9780323998734; eBook ISBN: 9780323999427, DOI: <https://doi.org/10.1016/C2021-0-00368-0>
20. Miranda, M., Pais, A. A. C. C., Vitorino, C., Topical bioequivalence design studies – an update, em Time-proof perspectives on bioequivalence, (Ed. Vitorino, C., Miranda, M., Almeida, A., Sousa, J.J.), Nova Science Publishers, Inc., 2023, Chapter 6., ISBN: 979-8-88697-604-5, DOI: 10.52305/WKNM2164
21. Neves, M., Miranda, M., Sousa, J.J, Vitorino, C., Physiologically-based pharmacokinetic modeling to support determination of drug product bioequivalence, em Time-proof perspectives on bioequivalence, (Ed. Vitorino, C., Miranda, M., Almeida, A., Sousa, J.J.), Nova Science Publishers, Inc., 2023, Chapter 13., ISBN is 979-8-88697-604-5, DOI: 10.52305/WKNM2164
22. M. M. Pereira, R. M. B. Carrilho, M. J. F. Calvete, “Tervalent Phosphorus Acid Derivatives”, in SPR Organophosphorus Chemistry, Vol. 52 (eds. Lee J. Higham, David W. Allen and John C. Tebby), The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2023, under edition.
23. M. M. Pereira, R. M. B. Carrilho, F. M. S. Rodrigues, L. D. Dias, M.J. F. Calvete, “Hydroformylation Catalysts for Fine Chemical Synthesis”, in Catalysis for a Sustainable Environment (ed. A. J. L. Pombeiro, M. Sutradhar, E. C. B. A. Alegria), John Wiley and Sons Ltd., New Jersey (USA), 2023. ISBN: 978-1-119-87052-4.
24. M. M. Pereira, M. J. F. Calvete, F. M. S. Rodrigues, R. M. B. Carrilho, L. D. Dias, “Green Approaches to Catalytic Processes under Alternative Reaction Media”, in Advanced Materials for Sustainable Environment: Development Strategies and Applications” (eds. N. Kumar, P. R. Makgware), CRC Press, Taylor & Francis, Boca Raton, Florida (USA), 2023, pp 25-56. ISBN: 9781003206385.

25. Fausto, R., Nikitin, T., Nogueira, B.A., Light Induced Reactions in Cryogenic Matrices (Highlights 2021-2022), em “Specialistic Reports in Photochemistry”, (Ed. S. Crespi e S. Protti), Royal Society of Chemistry (Londres, Reino Unido), 2023, Volume 51, Cap. 3, pp. 66-125. ISBN (Impresso) 978-1-83767-215-8; eISBN (pdf): 978-1-83767-230-1.
26. Ildiz, G.O., R. Fausto, R., Intramolecular Hydrogen Bonding: Shaping Conformers' Structure and Stability, em “Spectroscopy and Computation of Hydrogen-Bonded Systems”, Eds. M. J. Wojcik and Y. Ozaki, Wiley-VCH GmbH, Weinheim (Germany), 2023, Cap. 8, pp. 213-229. ISBN: 978-3-527-34972-2.
27. Rodrigues, S.P.J., Química e Literatura em Diálogo com as Outras Áreas de Ensino.” Em Química e Literatura: princípios teóricos e metodológicos e os contributos para o ensino e a formação de professores de Química, Silveira, M. P., Gonçalves, F. P. (Eds.) Editora UFFS, 2023, pp. 33-46.
28. Rodrigues, S.P.J. Porque o Diálogo Entre a Química e a Literatura Pode Ser Útil na Formação de Professores Para Além dos Temas e das Sequências Didáticas.” Em Química e Literatura: princípios teóricos e metodológicos e os contributos para o ensino e a formação de professores de Química, Silveira, M.P., Gonçalves, Fábio P. (Eds.) Editora UFFS, 2023, pp. 139-158.
29. Brandão, P., Pineiro, M., Mechanochemistry for Sustainable Drug Design and API Synthesis, em “Sustainable Approaches in Pharmaceutical Sciences”, (Ed. K. Shah, D. N. Chauhan, N. S.), Wiley & Sons Ltd, 2023, Cap. 11, pp 255-272. ISBN (Impresso) 978-1-119-88984-7
30. Antunes, F., Salvador, A. How Gradients and Microdomains Determine H₂O₂ Redox Signaling, em “Peroxiporins” (Ed. I. Medraño-Fernández, G.P. Bienert e R. Sitia), CRC Press (Boca Raton, FL, EUA), 2023, Cap. 2, pp. 5-20. eISBN: 9781003160649

Articles in International Peer-Reviewed Journals (156)

1. Reis, M. J. A., Nogueira, A. T., Eulálio, A., Moura, N. M. M., Rodrigues, J., Ivanou, D., Abreu, P. E., Correia, M. R. P., Neves, M. G. P. M. S., Pereira, A. M. V. M., Mendes, A., *C–N linked donor type porphyrin derivatives: unrevealed hole-transporting materials for efficient hybrid perovskite solar cells*, Dalton Trans., 52(41), 14762–14773, 2023
DOI: 10.1039/D3DT00512G
2. Matias, P. M. C., Sousa, J. F. M., Bernardino, E. F., Vareda, J. P., Durães, L., Abreu, P. E., Marques, J. M. C., Murtinho, D., Valente, A. J. M., Reduced Chitosan as a Strategy for Removing Copper Ions from Water, Molecules, 28, Art. N. 4110, 2023.
DOI: 10.3390/molecules28104110
3. Santos, J. R. C., Abreu, P. E., Marques, J. M. C., Aggregation patterns of curcumin and piperine mixtures in different polar media, Phys. Chem. Chem. Phys., 25, 19899–19910, 2023.
DOI: 10.1039/D3CP00096F
4. Galindres, D. M., Espitia-Galindo, N., Valente, A. J. M., Sofio, S. P. C., Rodrigo, M. M., Cabral, A. M. T. D. P. V., Esteso, M. A., Zapata-Rivera, J., Vargas, E. F., Ribeiro, A. C. F., Interactions of sodium salicylate with β -cyclodextrin and an anionic resorcin[4]arene: Mutual diffusion coefficients and computational study, Int. J. Mol. Sci., 24, 3921, 2023.
DOI: 10.3390/ijms24043921
5. Santos, C. I. A. V., Ribeiro, A. C . F., Shevtsova V., Binary Diffusion Coefficients for Short Chain Alcohols in Supercritical Carbon Dioxide—Experimental and Predictive Correlations, Molecules, 28, 782, 2023. DOI: 10.3390/molecules280207826.
6. Barros, M. C. F., Ribeiro, A. C. F., Santos, C. I. A. V., An Assessment of the Chemical Compatibility of Viton Fluoropolymers and Some Harsh Organic Liquid Mixtures. Processes, 11, 2088, 2023.
DOI: 10.3390/pr11072088
7. Galindres, D. M., Ribeiro, A. C. F., Esteso, M. A., Vargas, E. F., Standard molar properties of ionic resorcinarenanes in water and dimethylsulfoxide, J. Mol. Liq. 379, Art. N. 121653, 2023.
DOI: 10.1016/j.molliq.2023.121653
8. Trindade, A., Fangaia, S. I. G., Nicolau, P. M. G., Messias, A., Ribeiro, A. C. F., Silva, D. S. A., Valente, A. J. M., Rodrigo, M. M., Esteso, M. A., Transport properties of carbohydrates: towards the minimization toxicological risks of cobalt and chromium alloys, Processes 11 (6), 1701, 2023.
DOI: 10.3390//pr11061701
9. 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., Esteso, M. A., Effect of potassium dihydrogen citrate on the diffusion behaviour of citric acid, J. Chem Thermodyn., 179, Art. N. 106996, 2023.
DOI: 10.1016/j.jct.2022.106996

10. Ribeiro, A. C. F., Esteso, M. A., Cyclodextrins as drug release modulators and toxic compound removal agents), Editorial, *Biomolecules*, 13, 1056, 2023.
DOI: 10.3390/biom13071056
11. Musilová, L., Mrácek, A., Azevedo, E. F. G., Valente, A. J. M., Cabral, A. M. T. D. P. V., Ribeiro, A. C. F., Esteso, M. A., Interactions between Sodium Hyaluronate and \square -Cyclodextrin as Seen by Transport Properties, *Int. J. Mol. Sci.*, 24, 2889, 2023.
DOI: 10.3390/ijms24032889
12. Balu, K., Kaliyamoorthy, S., Durai, M., Aguiar, A., Sobral, M. C. M., Muthuvel, I., Kumaravel, S., Avula, B., Sobral, A. J. F., Ahn, Y.Ho, Porphyrins and ZnO hybrid semiconductor materials: a Review, *Inorg. Chem. Commun.*, 154, Art. N. 110973, 2023.
13. Ramanathan, S., Kasemchainan, J., Chuang, Ho-C., Sobral, A. J. F., Poompradub, S., Ramanathan, S., Kasemchainan, J., Poompradub, S., Rhodamine B dye degradation using used face masks-derived carbon coupled with peroxymonosulfate, *Environ. Pollut.*, 324, 121386, 2023.
DOI: 10.1016/j.envpol.2023.121386
14. Balu, K., Ramasundaram, S., Sepúlveda, R., Chicardi,E., Kumaravel, S., Josphin Mini, J., Oh, T. H., Avula,B., Sobral, A. J. F., Synthesis and characterization of visible active Fe grafted ZnO nanocomposites for NBB degradation in water, *Inorg. Chem. Commun.*, 154, 110963, 2023.
15. Kacemi, R., Campos M. G. Translational Research on Bee Pollen as a Source of Nutrients: A Scoping Review from Bench to Real World. *Nutrients*, 15(10), 2413, 2023.
DOI: 10.3390/nu15102413
16. Anjos, O., Seixas, N., Antunes, C., Campos M. G., Paula, V., Esteveho L., 2023. Quality of bee pollen submitted to drying, pasteurization and high-pressure processing – a comparative approach, *Food Res. Int.*, 170, 112964, 2023. ISSN 0963-9969
DOI: 10.1016/j.foodres.2023.112964
17. Delgado-Pinar, E., Medeiros, M., Costa, T. Seixas de Melo, J. Sérgio, Highly Selective Fluorescent Sensors: Polyethylenimine Derivatives of Triphenylamine and Coumarin for GTP and ATP Interaction via Fluorescence Lifetime Imaging Microscopy, *ACS Appl. Polym. Mater.*, 5, 2023, 6176-6185.
DOI: 10.1021/acsapm.3c00834
18. Costa, T., Peixoto, M., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. Sérgio, Solvent-Driven Self-Organization of Meso-Substituted Porphyrins: Morphological Analysis from Fluorescence Lifetime Imaging Microscopy, *Langmuir*, 39(16), 5727-5737, 2023.
DOI: 10.1021/acs.langmuir.2c03468
19. Nobre, D. C., Delgado-Pinar, E., Cunha, C., Galvão, A. M., Seixa de Melo, J. Sérgio, Indirubin: Nature finding efficient light-activated protective molecular mechanism, *Dyes Pigm.*, 212, 111116, 2023.
DOI: 10.1016/j.dyepig.2023.111116

20. Saadi, H., Benzarti, Z., Sanguino, P., Pina, J., Abdelmoula, N., Seixas de Melo, J. Sérgio, Enhancing the electrical conductivity and the dielectric features of ZnO nanoparticles through Co doping effect for energy storage applications, *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.*, 34(2), 116, 2023.
DOI: 10.1007/S10854-022-09470-5
21. Pinheiro, Daniela; Sousa, Joana F.M.; Pineiro, Marta; Valente, Artur J.M.; Seixas de Melo, J. Sérgio., Non-pre-treated sulfonated poly(ether ether ketone) membrane as an efficient alternative for Nafion in acidic aqueous organic redox flow batteries, *J. Energy Storage*, 57, 106201, 2023.
DOI: 10.1016/j.est.2022.106201
22. Rodrigues, A. C. B., Lopes, S. M., Cunha, C., Braz, J., Pinho e Melo, T. M., Seixas de Melo, J. Sérgio, Pineiro, M., The role of solvents and concentrations in the properties of oxime bearing A 2 B corroles, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 25(15), 10263-10277, 2023.
DOI: 10.1039/D2CP05941J
23. Iglesias-Mejuto, A., Lamy-Mendes, A., Pina, J., Costa, B. F., García-González, C. A., Durães, L., Synthesis of Highly Luminescent Silica-Coated Upconversion Nanoparticles from Lanthanide Oxides or Nitrates Using Co-Precipitation and Sol–Gel Methods, *Gels*, 10(1), 13, 2023.
DOI: 10.3390/gels10010013
24. Almeida, C. M., Pina, J., Magalhães, J. M., Barroso, M. F., Durães, L., One-pot synthesis of lanthanide-doped silica film as a ratiometric fluorescent probe for selective amine vapours detection, *Opt. Mater.*, 145, 114396, 2023.
DOI: 10.1016/j.optmat.2023.114396
25. Chaves, O. A., Loureiro, R. J., Costa-Tuna, A., Almeida, Z. L., Pina, J., Brito, R. M., Serpa, C., Interaction of Two Commercial Azobenzene Food Dyes, Amaranth and New Coccine, with Human Serum Albumin: Biophysical Characterization, *ACS. Food Sci. Technol.*, 3(5), 955-968, 2023.
DOI: 10.1021/acsfoodscitech.3c00125
26. Henriques, J., Pina, J., Braga, M. E., Dias, A., Coimbra, P., de Sousa, H. C., Novel Oxygen-and Curcumin-Laden Ionic Liquid@ Silica Nanocapsules for Enhanced Antimicrobial Photodynamic Therapy, *Pharmaceutics*, 15(4), 1080, 2023.
DOI: 10.3390/pharmaceutics15041080
27. Cunha, C., Peixoto, M., 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 Appl. Opt. Mater.*, 1(1), 340, 2023.
DOI: 10.1021/acsom.2c00067
28. Sousa, F. J. P. M., Jesus, C. F., Góis, J. R., Pereira, N. A. M., Antunes, F. E., Microcrystalline cellulose and by-products from the pulp and paper industry as reinforcing fibres for polybutylene succinate-based composites: A comparative study, *J. Reinf. Plast. Compos.*, 2023, in press.
DOI: 10.1177/07316844231198314

29. Melro, E., Duarte, H., Antunes, F. E., Valente, A. J. M., Romano, A., Norgren, M., Medronho, B., Engineering novel phenolic foams with lignin extracted from pine wood residues via a new levulinic-acid assisted process, *Int. J. Biol. Macromol.*, 125947, 248, 2023.
DOI: [10.1016/j.ijbiomac.2023.125947](https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2023.125947)
30. Melro, E., Riddell, A., Bernin, D., Costa, A. M. R., Valente, A. J. M., Antunes, F. E., Romano, A., Norgren, M., Medronho, B., Levulinic Acid-Based “Green” Solvents for Lignocellulose Fractionation: On the Superior Extraction Yield and Selectivity toward Lignin, *Biomacromolecules*, 24, 7, 3094-3104., 2023.
DOI: [10.1021/acs.biomac.3c00169](https://doi.org/10.1021/acs.biomac.3c00169)
31. Tavares, T., Venâncio, C., Duarte, C., Antunes, F. E., Lopes, I., Adding knowledge to the design of safer hydrophobically modified poly (acrylic) acids: an ecotoxicological approach, *Environ. Sci. Pollut. Res.*, 30 (13), 39258-39271, 2023.
DOI: [10.1007/s11356-022-24963-w](https://doi.org/10.1007/s11356-022-24963-w)
32. Freitas, A. R., Ribeiro, A. J., Ribeiro, A. B., Gonzalez, M. D. M. N. C., Silva, L. R., Alves, L., Melro, E., Antunes, F. E., Veiga, F., Morais, A. I.S., Bezerra, R. D. S., Sobrinho, J. L. S., Osajima, J. A., Filho, E. C. Silva, Modification of chicha gum: Antibacterial activity, ex vivo mucoadhesion, antioxidant activity and cellular viability, *Int. J. Biol. Macromol.*, 228, 594-603, 2023.
DOI: [10.1016/j.ijbiomac.2022.12.204](https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2022.12.204)
33. Teles, F., Antunes, F. E., Biopolymers as alternatives to synthetic polymers in flame-retarded polymeric composites: A study of fire and mechanical behaviors, *J. Vinyl. Addit. Technol.*, 29(1), 120, 2023.
DOI: [10.1002/vnl.21948](https://doi.org/10.1002/vnl.21948)
34. Mendes, M., Branco, F., Vitorino, R., Sousa, J., Pais, A., Vitorino, C., A two-pronged approach against glioblastoma: drug repurposing and nanoformulation design for in situ-controlled release, *Drug Deliv. Transl. Res.*, 2023.
DOI: [10.1007/s13346-023-01379-8](https://doi.org/10.1007/s13346-023-01379-8)
35. Arnaut, Z.A., Pinto, S.M.A., Aroso, R.T., Amorim, A.S., Lobo, C.S., Schaberle, F.A., Pereira, D., Núñez, J., Nunes, S.C.C., Pais, A.A.C.C., Rodrigues-Santos, P., Pereira de Almeida, L., Pereira, M.M., Arnaut, L.G., Selective, broad-spectrum antiviral photodynamic disinfection with dicationic imidazolyl chlorin photosensitizers, *Photochem & Photobiol. Sci.*, 22, 2607–2620, 2023.
DOI: [10.1007/s43630-023-00476-4](https://doi.org/10.1007/s43630-023-00476-4)
36. Pinto, S. M. A., Ferreira, A. R. R., Teixeira, D. S. S., Nunes, S. C. C., Batista de Carvalho, A. L. M., Almeida, J. M. S., Garda, Z., Pallier, A., Pais, A. A. C. C., Brett, C. M. A., Tóth, É., Marques, M. P. M., Pereira, M. M., Geraldes, C. F. G. C., Fluorinated Mn(III)/(II)-Porphyrin with Redox-Responsive ¹H and ¹⁹F Relaxation Properties, *Chem. Eur. J.* 29, e202301442, 2023.
DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.202301442>

37. Lã, F. M.B., Polo, N., Granqvist, S., Cova, T., Pais, A.C., Female Voice-Related Sexual Attractiveness to Males: Does it Vary With Different Degrees of Conception Likelihood?, *J. Voice*, 37, 3, 467.e19-467.e31, 2023
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jvoice.2021.02.006>

38. Miranda, M., Cardoso, C., Pais, A.A.C.C, Brown, M., Vitorino, C., Drilling down the bioequivalence assessment of topical antifungal products: Microstructure and release, *Eur. J. Pharm. and Biopharm.*, 185, 94-106, 2023.
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ejpb.2023.02.006>

39. Mendes, M., Sousa, J., Pais, A., Vitorino, C., Can Celecoxib Assay in Preclinical Studies Be Improved?, *Processes*, 11(2), 431, 2023.
DOI: <https://doi.org/10.3390/pr11020431>

40. Benzi, A., Lopes, S.M.M., Nunes, S.C.C., Giorgi, G., Bianchi, L., Tavani, L., Pais, A.A.C.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, *Front Chem.*, 11, 1229669, 2023.
DOI: [10.3389/fchem.2023.1229669](https://doi.org/10.3389/fchem.2023.1229669)

41. Utzeri, G., Cova, T.F., Murtinho, D., Pais, A.A.C.C., Valente, A.J.M., Insights on macro- and microscopic interactions between Confidor and cyclodextrin-based nanosplices, *Chem. Eng. J.*, 455, 2, 140882, 2023.
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2022.140882>

42. Aguirre, A. A. C., Español, E. S., Maldonado, Esteso, M. A., DMSO-controlled self-assembly of supramolecular structures of aryl-resorcin-arenes, *J. Mol. Liq.*, 387, 122703, 2023.
DOI: [10.1016/j.molliq.2023.122703](https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.122703)

43. Trigo-López, M., Miguel, A., García, J. M., Mendía, A., Ruiz, V., Valente, A. J. M., Vallejos, S., Crafting and Analyzing Multi-Structured Aramid Materials and Their Pyrolytic Transformations: A Comprehensive Exploration, *Polymers*, 15, 4315, 2023.
DOI: <https://doi.org/10.3390/polym15214315>

44. Aguado, R. J., Gomes, B. O., Durães, L., Valente, A. J. M., Luminescent Papers with Asymmetric Complexes of Eu(III) and Tb(III) in Polymeric Matrices and Suggested Combinations for Color Tuning, *Molecules*, 28, 6164, 2023.
DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules28166164>

45. Gawryszewska, P., Miller, L.W., Valente, A. J. M., Editorial: Hot topic: luminescence in rare earth coordination compounds, *Frontiers Chemistry*, 11, 1258607, 2023.
DOI: <https://doi.org/10.3389/fchem.2023.1258607>

46. Roque, M. I., Gomes, J., Reva, I., Valente, A. J. M., Simões, N. E., Morais, P. V., Durães, L., Martins, R. C., An Opinion on the Removal of Disinfection Byproducts from Drinking Water, *Water*, 15, 1724,

2023.

DOI: <https://doi.org/10.3390/w15091724>

47. Matias, P. M. C., Murtinho, D., Valente, A. J. M., Triazine-Based Porous Organic Polymers: Synthesis and Application in Dye Adsorption and Catalysis, *Polymers*, 15, 1815, 2023.

DOI: <https://doi.org/10.3390/polym15081815>

48. Machado, T. F., Valente, A. J. M., Serra, M. E. S., Murtinho, D., Diazo-coupled Porous Organic Polymers as Efficient Catalysts for Metal-Free Henry and Knoevenagel Reactions, *Microporous and Mesoporous Materials*, 355, 112561, 2023.

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2023.112561>

49. González-Ceballos, L., Guirado-Moreno, J. C., Utzeri, G., García, J. M., Fernández-Muino, M. A., Osés, S. M., Sancho, M. T., Arnaiz, A., Valente, A. J. M., Vallejos, S., Straightforward purification method for the determination of the activity of glucose oxidase and catalase in honey by extracting polyphenols with a film-shaped polymer, *Food Chemistry*, 405 (Part A), 134789, 2023.

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2022.134789>

50. Pedro, S.N., Gomes A.T.P.C., Vilela C., Vitorino, C., Fernandes, R., Almeida, A., Amaral, M.H., Freire, M.G., Armando J. D. Silvestre, A.F.D., Freire, Thermo-responsive microemulsions containing deep eutectic-based antibiotic formulations for improved treatment of resistant bacterial ocular infections, *Advanced Therapeutics*, 6 (2023) 2200235

DOI: [10.1002/adtp.202200235](https://doi.org/10.1002/adtp.202200235)

51. Authors: Barzegar-Behrooz, A., Navid, H. L., Da Silva Rosa, S. C., Swiat., M., Wiechec, E., Vitorino, C., Vitorino, R., Jamalpoor, Z., Ghavami, S., Integrating Multi-Omics Analysis for Enhanced Diagnosis and Treatment of Glioblastoma: A Comprehensive Data-Driven Approach, *Cancers*, 15 (2023) 3158

DOI: <https://doi.org/10.3390/cancers15123158>

52. Chiarentin, L., Cardoso, C., Miranda, M., Vitorino, C., Rheology of complex topical formulations: an Analytical Quality by Design Approach to Method Optimization and Validation, *Pharmaceutics*, 15:7 (2023) 1810

DOI: <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics15071810>

53. Sena, A., Costa, A., Bastos, F., Pinto, A.C., Vitorino, C., Nunes, A., Simões, S., Development of a buccal in vitro permeation method - exploring aQbD implementation, *International Journal of Pharmaceutics*, 643 (2023) 123255

DOI: [10.1016/j.ijpharm.2023.123255](https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2023.123255)

54. Chiarentin, L., Gonçalves, C., Augusto, C., Miranda, M., Cardoso, C., Vitorino, C., Drilling into “Quality by Design” Approach for Analytical Methods, *Critical Reviews in Analytical Chemistry*

DOI: [10.1080/10408347.2023.2253321](https://doi.org/10.1080/10408347.2023.2253321)

55. Simões, A.I., Castro, R., Veiga, F., Vitorino, C., A quality by design framework for developing nanocrystal bioenabling formulations, *International Journal of Pharmaceutics*, 646 (2023) 123393
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2023.123393>
56. Coimbra, P., Marona, B., Henriques, M. H. F., Campos, L., Gomes, D. M. G. S., Vitorino, C., Sousa, J. J., Braga, M. E. M., Gaspar, M. C., Edible films based on potato and quince peels with potential for the preservation of cured cheese, *Food Packaging and Shelf Life*, 2023 (40) 101176
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fpsl.2023.101176>
57. Simões, A., Veiga, F., Vitorino, C., Question-based review for pharmaceutical development: an enhanced quality approach, *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*, 29 (2023) 114174
DOI: [10.1016/j.ejpb.2023.114174](https://doi.org/10.1016/j.ejpb.2023.114174)
58. M. I. P. Mendes, L. G. Arnaut. “Redaporfin Development for Photodynamic Therapy and its Combination with Glycolysis Inhibitors”. *Photochem. Photobiol.*, 99 (2023) 769-776
DOI: [10.1111/php.13770](https://doi.org/10.1111/php.13770)
59. M. Penetra, L. G. Arnaut, L. C. Gomes-da-Silva. “Trial Watch: An update of clinical advances in photodynamic therapy and its immunoadjuvant properties for cancer treatment” *Oncolmmunol.*, 12 (2023)
DOI: [10.1080/2162402X.2023.2226535](https://doi.org/10.1080/2162402X.2023.2226535)
60. L. G. Arnaut, M. M. Pereira. “Overcoming the challenges of infrared photosensitizers in Photodynamic Therapy: The making of redaporfin”. *Chem. Commun.*, 59 (2023) 9457-9468.
DOI: [10.1039/D3CC02283H](https://doi.org/10.1039/D3CC02283H)
61. C. S. Lobo, M. I. P. Mendes, D. A. Pereira, L. C. Gomes-da-Silva, L. G. Arnaut. “Photodynamic therapy changes tumour immunogenicity and promotes immune-checkpoint blockade response, particularly when combined with micromechanical priming”. *Sci. Rep.*, 13 (2023) 11667.
DOI: [10.1038/s41598-023-38862-8](https://doi.org/10.1038/s41598-023-38862-8)
62. Z. A. Arnaut, S. M. A. Pinto, R. T. Aroso, A. S. Amorim, C. S. Lobo, F. A. Schaberle, D. Pereira, J. Núñez, S. C. C. Nunes, A. A. C. C. Pais, P. Rodrigues-Santos, L. P. Almeida, M. M. Pereira, L. G. Arnaut. “Selective, broad-spectrum antiviral photodynamic disinfection with dicationic imidazolyl chlorin photosensitizers”. *Photochem. Photobiol. Sci.*, 22 (2023) 2607-2620.
DOI: [10.1007/s43630-023-00476-4](https://doi.org/10.1007/s43630-023-00476-4)
63. M. I. P. Mendes, C. D. F. Coelho, F. A. Schaberle, M. J. Moreno, M. J. F. Calvete, L. G. Arnaut. “Nanodroplet vaporization with pulsed-laser excitation repeatedly amplify photoacoustic signals at low vaporization thresholds”. *RSC Adv.*, 13 (2023) 35040-35049.
DOI: [10.1039/d3ra05639b](https://doi.org/10.1039/d3ra05639b)
64. A. I. Mata, N. A. M. Pereira, A. L. Cardoso, B. F. O. Nascimento, M. Pineiro, F. A. Schaberle, L. C. Gomes-da-Silva, LC, R. M. M. Brito, T. M. V. D. Melo, “Novel Foscan®-derived ring-fused chlorins for

photodynamic therapy of cancer” Bioorganic & Medicinal Chemistry, 93 (2023) 117443.
DOI: 10.1016/j.bmc.2023.117443

65. B. A. Nogueira, N. C. T. Tavares, M. I. P. Mendes, D. A. Pereira, A. Duque-Prata, F. A. Schaberle, “A Preuniversity Initiative to Motivate Students to Pursue Chemistry Higher Education” Journal of Chemical Education, 100 (2023) 1189-1196
DOI: 10.1021/acs.jchemed.2c01095

66. C. Donohoe, A. Charisiadis, S. Maguire, B. Twamley, F. A. Schaberle, L. C. Gomes-da-Silva, M. O. Senge, “Strapped Porphyrins as Model Systems for Atropisomeric Photosensitizer Drugs” European Journal of Organic Chemistry, 26 (2023).
DOI: 10.1002/ejoc.202201453
Front cover: <https://doi.org/10.1002/ejoc.202300270>

67. A. Duque-Prata, T.B. Pinto, C. Serpa, P.J.S.B. Caridade, “Performance of Functionals and Basis Sets in Calculating Redox Potentials of Nitrile Alkenes and Aromatic Molecules using Density Functional Theory” ChemistrySelect, 8 (2023)
DOI: 10.1002/slct.202300205

68. A. Duque-Prata, C. Serpa, P.J.S.B. Caridade, “Full theoretical protocol for the design of metal-free organic electron donor–spacer–acceptor systems” Physical Chemistry Chemical Physics, 25 (2023) 27854-27865
DOI: 10.1039/D3CP03323F

69. P. Gierlich, C. Donohoe, K. Behan, D. J. Kelly, M. O. Senge, L. C. Gomes-da-Silva “Anti-tumor immunity mediated by photodynamic therapy using injectable chitosan hydrogels for intra-tumoral and sustained drug delivery”. ACS Biomacromolecules, October 2023
DOI: 10.1021/acs.biomac.3c00591
Front cover: <https://pubs.acs.org/toc/bomaf6/25/1>.

70. O. A. Chaves, R. Loureiro, A. F. C. Tuna, Z. A. Almeida, J. Pina, R. M. M. Brito, C. Serpa, “Interaction of Two Commercial Azobenzene Food Dyes, Amaranth and New Coccine, with Human Serum Albumin: A Biophysical Characterization”, ACS Food Science & Technology, 3 (2023) 955–968.
DOI: 10.1021/acsfoodscitech.3c00125 Front cover

71. T.B. Pinto, S.M.A. Pinto, A.P. Piedade, C. Serpa, “Ultrathin Materials for Wide Bandwidth Laser Ultrasound Generation: Titanium Dioxide Nanoparticles Films with Adsorbed Dye”, Nanoscale Advances, 5 (2023) 4191-4202.
DOI: 10.1039/d3na00451a

72. R. Cimino, E. Gatto, M. De Zotti, F. Formaggio, C. Toniolo, M. Giannetti, A. Palleschi, C. Serpa, M. Venanzi, “Peptide-Bridged bis-Porphyrin Compounds: A Photophysical and Molecular Dynamics Study”, J. Photochemistry Photobiology A:Chemistry, 16 (2023) 100191.
DOI: 10.1016/j.jpap.2023.100191

73. R. M. B. Carrilho, M. J. F. Calvete, G. Mikle, L. Kollár, M.M. Pereira. Carbon “Monoxide as C1 Building Block in Fine Chemical Synthesis”, Chinese Journal of Chemistry, 42 (2023), 199
DOI: 10.1002/cjoc.202300384

74. F. M.S. Rodrigues, V. Masliy, M. F.C. Silva, A. P. Felgueiras, R.M.B. Carrilho, M. M. M. Pereira, “Catalytic multi-step continuous-flow processes for scalable transformation of eugenol into potential fragrances”, Catalysis Today 418 (2023), 114055
DOI: 10.1016/j.cattod.2023.114055.

75. F.M.S. Rodrigues, I. Tavares, R.T. Aroso, L.D. Dias, C.V. Domingos, C.M.G. de Faria, G. Piccirillo, T. M. R. Maria, R. M. B. Carrilho, V. S. Bagnato, M. J. F. Calvete, M. M. Pereira, “Photoantibacterial poly(vinyl)chloride films applying curcumin derivatives as bio-based plasticizers and photosensitizers”, Molecules, 28 (2023)
DOI: 10.3390/molecules28052209

76. D.S.S. Teixeira, R.T. Aroso, J.M.S. Almeida, C.M.A. Brett, M.J.F. Calvete, S.M.A. Pinto, M.M. Pereira, “Microwave synthesis of cationic ABAB di-imidazolyl fluorinated porphyrins and manganese complexes”, Journal of Porphyrins and Phthalocyanines, 27 (2023), 614.
DOI: 10.1142/S1088424623500475

77. G. Piccirillo, N. Maldonado-Carmona, D. L. Marques, N. Villandier, C. A. Calliste, S. Leroy-Lhez, M.E.S. Eusébio, M.J.F. Calvete, M.M. Pereira, Porphyrin@Lignin nanoparticles: Reusable photocatalysts for effective aqueous degradation of antibiotics, Catalysis Today, 423 (2023) 113903.
DOI: 10.1016/j.cattod.2022.09.009.

78. S.M.A. Pinto, A.R.R. Ferreira, D.S.S. Teixeira, S.C.C. Nunes, A.L.M. Batista de Carvalho, J.M.S. Almeida, Z. Garda, A. Pallier, A.A.C.C. Pais, C.M.A. Brett, É. Tóth, M.P.M. Marques, M.M. Pereira, C.F.G.C. Geraldes, “Fluorinated Mn(III)/(II)-Porphyrin with Redox-Responsive ¹H and ¹⁹F Relaxation Properties”, Chem. Eur. J., 29(2023)
DOI: 10.1002/chem.202301442.

79. G. Piccirillo, R.B. De Sousa, Luca.D. Dias, M. J. F. Calvete, “Degradation of Pesticides Using Semiconducting and Tetrapyrrolic Macrocyclic Photocatalysts—A Concise Review”, Molecules, 28 (2023), 7677.

80. Nunes, C.M., Lopes Jesus, A.J., Rosado, M.T.S., Fausto, R., On the Carbenic Nature of Nitrile Ylides: Experimental and Computational Characterization of Hydroxy and Amino Nitrile Ylides, Eur. J. Org. Chem., Art. N° e202301103, 2023.
DOI: 10.1002/ejoc.202301103

81. Ivanov, M., Grempka, A., Buryakov, A., Nikitin, T., Justino, L.L.G., Fausto, R., Vilarinho, P.M., Paixão, J.A., Nanoscale Study of the Polar and Electronic Properties of a Molecular Erbium(III) Complex Observed via Scanning Probe Microscopy, Crystals, 13, Art. N° 1331, 2023.
DOI: 10.3390/cryst13091331

82. Aysal, N., Kurt, Y., Öztürk, H., Ildiz, G.O., Yesiltas, M., Laçin, D., Öngen, S., Nikitin, T., Fausto, R., Crystallization Kinetics: Relationship between Crystal Morphology and the Cooling Rate - Applications for Different Geological Materials, *Crystals*, 13, Art. N° 1130, 2023.
DOI: [10.3390/crust13071130](https://doi.org/10.3390/crust13071130)
83. Lopes, S., Nikitin, T., Fausto, R., Phenylpropionic Acid Isolated in Cryogenic Nitrogen and Xenon matrices: NIR and UV-Induced Study, *J. Chem. Phys.*, 159, Art. N° 164311, 2023
DOI: [10.1063/5.0167128](https://doi.org/10.1063/5.0167128)
84. Sequeira, M.C.M., Nogueira, B.A., Caetano, F.J.P., Diogo, H.P., Fareleira, J.M.N.A., Fausto, R., Di-Alkyl Adipates as New Phase Change Material for Low Temperature Energy Storage, *Intl. J. Thermophys.*, 44, Art. N° 165, 2023. Erratum: ibidem, 45, Art. N° 2, 2024.
DOI: [10.1007/s10765-023-03274-3](https://doi.org/10.1007/s10765-023-03274-3)
85. Lopes, S., Nikitin, T., Fausto, R., Photochemical Study and Vibrational Spectra of Propiolamide Isolated in Low-Temperature Ar, Xe and N₂ Matrices, *J. Photochem. Photobiol. A: Chemistry*, 438, Art. N° 114487, 2023.
DOI: [10.1016/j.jphotochem.2022.114487](https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2022.114487)
86. Roque, J.P.L., Rosado, M.T.S., Fausto, R., Reva, I., Dual Photochemistry of Benzimidazole, *J. Org. Chem.*, 88, pp. 2884-2897, 2023.
DOI: [10.1021/acs.joc.2c02560](https://doi.org/10.1021/acs.joc.2c02560)
87. Sıdir, İ., Kara, Y.E., Sıdir, Y.G., Berber, H., Fausto, R., Reversal in Solvatochromism, Photochromism and Thermochromism in a New bis-Azo Dye Based on Naphthalen-1-amine, *J. Photochem. Photobiol. A: Chemistry*, 446, Art. N° 115138, 2023.
DOI: [10.1016/j.jphotochem.2023.115138](https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2023.115138)
88. Brito, A.L.B., Lopes, S., Ildiz, G.O., Fausto, R., Structure, Vibrational Spectra, and Cryogenic Matrix Photochemistry of 6-Bromopyridine-2-Carbaldehyde: From the Single Molecule of the Compound to the Neat Crystalline Material, *Molecules*, 28, Art. N° 1673, 2023.
DOI: [10.3390/molecules28041673](https://doi.org/10.3390/molecules28041673)
89. Elhamdi, I., Souissi, H., Kammoun, S., Dhahri, E., Brito, A.L.B., Fausto, R., Costa, B.F.O., Experimental Determination and Modeling of Structural, Vibrational and Optical Properties of the ZnAl_{2-x}Cr_xO₄ ($x = 0$ and 0.05) Spinels, *J. Lumin.*, 263, Art., N° 119968, 2023.
DOI: [10.1016/j.jlumin.2023.119968](https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2023.119968)
90. Fakhri, P., Eaianli, N., Bagherzadeh, R., Jaleh, B., Sillanpää, M., Fausto, R., Sandwich-Type Double-Layer Piezoelectric Nanogenerators Based on One- and Two-Dimensional ZnO Nanostructures with Improved Output Performance, *Sci. Reports*, 13, Art. N° 16412, 2023.
DOI: [10.1038/s41598-023-43047-4](https://doi.org/10.1038/s41598-023-43047-4)

CQC – Overall Output Indicators 2023

91. Amado, P.S.M., Lopes, S., Brás, E.M., Paixão, J.A., Abe, M., Fausto, R., Cristiano, M.L.S., Molecular and Crystal Structure, Spectroscopy and Photochemistry of a Dispiro Compound Bearing the Tetraoxane Pharmacophore, *Chem. Eur. J.*, 29, Art. N° e202301315, 2023.
DOI: 10.1002/chem.202301315
92. Ferreira, G.A., Nunes, C.M., Lopes Jesus, A.J., Fausto, R., Para and Meta OH Substitution Effect on C Phenyl Nitrilimine Bond Shift Isomers, *Eur. J. Org. Chem.*, 26, Art. N° e202300310, 2023.
DOI: 10.1002/ejoc.202300310
93. Sıdir, İ., Gülsen Seven Sıdir, Y., Berber, H., Fausto, R., Effects of Enol-imine/Keto-amine Tautomerism and Conformational Changes on the UV-Vis Absorbance and Fluorescence Emission Spectra of a Novel ortho-Hydroxyaryl Schiff Base Bearing the 1,2,4-Triazole Core in Different Solvents, *J. Mol. Struct.*, 1292, Art. N° 136191, 2023.
DOI: 10.1016/j.molstruc.2023.136191
94. António, C.T., Évora, A.O.L., Bernardes, C.E.S., Diogo, H.P., de Araujo, G.L.B., Smith, P., Byrn, S.R., Fausto, R., Minas da Piedade, M.E., Polymorphism in Erlotinib Hydrochloride: New Insights into Relative Stability, Thermal Behavior and Structural Differences of Forms A and B, *Cryst. Growth Des.*, 23, pp. 7374-7384, 2023.
DOI: 10.1021/acs.cgd.3c00791
95. Ahokas, J., Nikitin, T., Krupa, J., Kosendiak, I., Fausto, R., Wierzejewska, M., Lundell, J., Conformational Hindered Ultraviolet Photodissociation of Glycolic Acid in an Argon Matrix, *Photochem.*, 3, Art. N° 197, 2023. – Selected for cover of the journal
DOI: 10.3390/photochem3020013
96. Ooshall, F., Jamehbozorgi, S., Golbedaghi, R., Justino, L.L.G., Feshalame, K.M., Liyghati-Delshad, M., Anaklı-Ardakani, A., Jaleh, B., Fausto, R., Synthesis, Characterization and Sensing Mechanism of a Novel Fluorescence Probe for Fe(III) in Semi-aqueous Solution Based on a Schiff Base Hexadentate Receptor, *Inorg. Chim. Acta*, 558, Art. N° 121761, 2023.
DOI: 10.1016/j.ica.2023.121761
97. Brito, A.L.B., Justino, L.L.G., Çatikkas, B., Lopes, S., Ildiz, G.O., Fausto, R., Structure, Conformational Landscape and UV-induced Selective Rotamerization of 2-Aminoacetanilide, *J. Photochem. Photobiol. A: Chemistry*, 435, Art., N° 114302, 2023.
DOI: 10.1016/j.jphotochem.2022.114302
98. Silva, J.F.C., Pereira Silva, P.S., Ramos Silva, M., Fantechi, E., Chelazzi, L., Ciattini, S., Eusébio, M.E.S., Rosado, M.T.S., Amorphous Solid Forms of Ranolazine and Tryptophan and Their Relaxation to Metastable Polymorphs, *Cryst. Growth Des.* 23, 6679–6691, 2023.
DOI:10.1021/acs.cgd.3c00565
99. Ferreira, P. O, Almeida, A. C., Costa, G. P., Torquetti, C., João A. Baptista, J. A., Eusébio, M.E.S., Caires,F. J., Castro, R.A.E, Norfloxacin cocrystals: mechanochemical synthesis and scale-up viability

through solubility studies, J. Pharm. Sci., 112, 2230-2239 (2023).
DOI: 10.1016/j.xphs.2023.03.003

100. Silva, J.F.C., Rosado, M.T.S., Maria, T.M.R., Pereira Silva, P.S., Ramos Silva, M., Eusébio, M.E.S., Introduction to Pharmaceutical Co-amorphous Systems Using a Green Co-milling Technique, J. Chem. Educ., 100, 1627–1632, 2023.
DOI: 10.1021/acs.jchemed.3c00036

101. Ekawa, B., Diogo, H.P., Castro, R.A.E., Caires, F. J., Eusébio, M.E.S., Coamorphous systems of valsartan: Thermal Analysis contribution to evaluate intermolecular interactions effects on the structural relaxation, Molecules 28, 6240, 2023.
DOI: 10.3390/molecules2817624,

102. Gałzka, M., Jasiurkowska-Delaporte, M., Eusébio M.E.S., Rosado, M.T.S., Juszyńska-Gałzka, E., Dryzek, E., Study on molecular dynamics and phase transitions in 1,2-cyclohexanediol and 1,3-cyclohexanediol isomers by calorimetry and dielectric spectroscopy, J. Mol. Liq., 369, 120874, 2023.
DOI: 10.1016/j.molliq.2022.120874

103. Simões, A., Castro, R. A.E. Veiga, F., Vitorino, C., A quality by design framework for developing nanocrystal bioenabling formulations, Int. J. Pharm., 46, 123393, 2023.
DOI: 10.1016/j.ijpharm.2023.123393

104. Rodrigues, F.M.S., Tavares, I., Aroso, R.T., Dias, L.D., Domingos, C.V., de Faria, C.M.G., Piccirillo, G., Maria, T.M.R., Carrilho, R.M.B., Bagnato, V.S., Calvete, M.J.F., Pereira, Photoantibacterial Poly(vinyl)chloride Films Applying Curcumin Derivatives as Bio-Based Plasticizers and Photosensitizers, Molecules, 28, 2209, 2023.
DOI: 10.3390/molecules28052209

105. Nogueira, B.A., Lopes, S.M.M., Rodrigues, A.C.B., Eusébio, M.E.S., André, V., Duarte, T., Paixão, J. A., Pinho e Melo, T.M.V.D., Fausto, R., Unveiling the Red and Brownish-Green Polymorphs of a Novel ROY Derivative: 2-(4-((3-Cyanothiophen-2-yl)amino)-3-nitrophenyl)acetic acid, Cryst. Growth Des. (in the press).

107. Sequeira, M.C.M., Nogueira, B.A., Caetano, F.J.P., Diogo, H.P., Fareleira, J.M.N.A., Fausto, R., Solid-liquid Phase Equilibrium: Alkane Systems for Low Temperature Energy Storage, Intl. J. Thermophys. (in the press)
URL: <https://npx.pt/threads/solid-liquid-phase-equilibrium-alkane-systems-for-low-temperature-energy-storage.36851/>

108. Viegas, L.P., A Multiconformational Transition State Theory Approach to OH Tropospheric Degradation of Fluorotelomer Aldehydes, ChemPhysChem, 24 e202300259, 2023.
DOI: 10.1002/cphc.202300259

CQC – Overall Output Indicators 2023

- I09. Viegas, L.P., Jensen F., A Computer-based Solution to the Oxidation Kinetics Of Fluorinated And Oxygenated Volatile Organic Compounds, *Environ. sci. Atmos.*, 3, 855-871 (2023).
DOI: 10.1039/d2ea00164k
- I10. Viegas, L.P., Multiconformer Transition State Theory Rate Constant and Branching Ratios for the OH-initiated Reaction of CH₂OCF₂CHF₂ and its Primary Product, HC(O)OCF₂CHF₂, *J. Phys. Org. Chem.*, 36, e4470 (2023).
DOI: 10.1002/poc.4470
- I11. Duque-Prata, A., Pinto, T.B., Serpa, C., Caridade, P.J.S.B., Performance of Functionals and Basis Sets in Calculating Redox Potentials of Nitrile Alkenes and Aromatic Molecules using Density Functional Theory, 8, e202300205 (2023).
DOI: 10.1002/slct.202300205
- I12. Galvao, B.R.L., Caridade, P.J.S.B., Mota, V.C., Varandas, A.J.C., SiS Formation in the Interstellar Medium via SiH plus S Collisions, *MNRAS*, 525, 5353-5358 (2023).
DOI: 10.1093/mnras/stad2580
- I13. Duque-Prata, A.; Serpa, C., Caridade, P.J.S.B., Full Theoretical Protocol for the Design of Metal-free Organic Electron Donor-Spacer-Acceptor Systems, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 25, 27854-27865 (2023).
DOI: 10.1039/d3cp03323f
- I14. Alves, M.O., Mota, V.C., Braga, J.P., Varandas, A.J.C., Guo, H., Galvao, B.R.L., High-accuracy DMBE potential energy surface for CNO(4 A'') and the rate coefficients for the C plus NO reaction in the 2A', 2A'', and 4A'' states, *J. Chem. Phys.*, 159, 214307 (2023).
DOI: 10.1063/5.0180918
- I15. Borges, Y.G., Galvao, B.R.L., Mota, V.C., Varandas, A.J.C., Corrigendum to “A Trajectory Surface Hopping Study of N2(A3Σu+) Quenching by H Atoms” [Chem. Phys. Lett. 729 (2019) 6164], *Chem. Phys. Lett.* 832, 140875 (2023).
DOI: 10.1016/j.cplett.2023.140875
- I16. Varandas, A.J.C., Tiling a Molecule: Is Partially Hydrogenated Graphene Planar Infinite Benzene?, *Chem. Phys. Lett.* 831, 140836 (2023).
DOI: 10.1016/j.cplett.2023.140836
- I17. Freitas, D.P., Pansini, F.N.N., Varandas, A.J.C. Linear and Cyclic (HCN)_n clusters: A DFT study of IR and Raman Spectra, *Chem. Phys. Lett.*, 828, 140734 (2023).
DOI: 10.1016/j.cplett.2023.140734
- I18. Lu, D.D., Galvao, B.R.L., Varandas, A.J.C., Guo, H. Quantum and Semiclassical Studies of Nonadiabatic Electronic Transitions Between N(4S) and N(2D) by collisions with N₂, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 25, 5656-15665 (2023).
DOI: 10.1039/d3cp01429k

I19. Varandas, A.J.C., Carbon-[n]Triangulenes and Sila-[n]Triangulenes: Which Are Planar?, *J. Phys. Chem. A*, 127, 5048-5064 (2023).
DOI: 10.1021/acs.jpca.3c01820

I20. Varandas, A.J.C., Can the Quasi-molecule Concept Help in Deciphering Planarity? The Case of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons, *Int. J. Quantum Chem.*, 123, e27036 (2023).
DOI: 10.1002/qua.27036

I21. Varandas, A.J.C., Why Are Some B₆-nN_nH₆ Molecules Planar and Others Not? Insights From Quasi-molecule Theory, *Mol. Phys.*, e2285032 (2023).
DOI: 10.1080/00268976.2023.2285032

I22. Fonseca, V.F., Rodrigues, S.P.J.; Pazinato, Maurícius S., Os Currículos dos Primeiros Cursos de Química da Universidade de Coimbra e de Universidades Brasileiras, *Quimica Nova*, 46, 117-125, 2023.
DOI: 10.21577/0100-4042.20170956

I23. Silva, F., Veiga, F., Rodrigues, S.P.J.; Cardoso, C.; Paiva-Santos, A.C., COSMO Models for the Pharmaceutical Development of Parenteral Drug Formulations, *Eur J Pharm Biopharm*, 187, 156-165, 2023.
DOI: 10.1016/j.ejpb.2023.04.019

I24. Pérez-Parallé, M.L., García, T.M.O., Rodrigues, S.P.J., Pazos, A.J., Uso de mapas conceituais como recurso didático para alunos de Bioquímica, *Revista de Docência no Ensino Superior*, 13, e044585, 2023.
DOI: 10.35699/2237-5864.2023.44585

I25. Rodrigues, Sérgio P. J.; Lamanna, Roberto; Casaleiro, Pedro; Martins, Décio R. História do ensino da história e filosofia das ciências na Universidade de Coimbra de meados de 1960 até meados de 1980, *História da Ciência e Ensino Construíndo interfaces* 27, 14-21, 2023.
DOI: 10.23925/2178-2911.2023v27p14-21

I26. Lopes, S. M. M., Santos, J. R. C., Peřina, M., Jorda, R., Pinho e Melo, T. M. V. D., Ring-Fused 3 β -Acetoxyandrost-5-enes as Novel Neuroprotective Agents with Cholinesterase Inhibitory Properties, *J. Steroid Biochem. Mol. Biol.*, 225, Art. N. 106194, 2023.
DOI: 10.1016/j.jsbmb.2022.106194

I27. Rodrigues, A. C., Lopes, S. M. M., Cunha, C., João Braz, J., Pinho e Melo, T. M. V. D., Seixas de Melo, J. S., Pineiro, M., The Role of the Solvent and Concentration on the Properties of Oxime Bearing A2B Corroles, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 25, pp 10263-10277, 2023.
DOI: 10.1039/d2cp05941j

I28. Marques, A. R. A., Calado, R. D. A., Ferreira, I. S., Ramos, C., Ramalho, J., Soares, M. I. L., Pereira, T., Oliveira, L., Vicente, J. R., Wong, L. H., Simões, I. C. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Peden, A.,

Almeida, C. G., Futter, C. E., Puertollano, R., Vaz, W. L. C., Vieira, O. V., Oxidized Cholestryl Ester Induces Exocytosis of Dysfunctional Lysosomes in Lipidotic Macrophages, *Traffic*, 24, pp 284-307, 2023.
DOI: 10.1111/tra.12888

I29. Moreira, A.S.P., Gaspar, D., Ferreira, S.S., Correia, A., Vilanova, M., Perrineau, M.-M., Kerrison, P.D., Gachon, C.M.M., Domingues, M.R., Coimbra, M.A., Coreta-Gomes, F., Nunes, C., Water-Soluble Saccharina latissima Polysaccharides and Relation of Their Structural Characteristics with In Vitro Immunostimulatory and Hypocholesterolemic Activities, *Mar. Drugs* 21, Art. N. 183, 2023.
DOI: 10.3390/md21030183

I30. Gaifem, J., Matthiesen, R., Saraiva, D., Bento, L., Marques, A., Soares, M. I. L., Sampaio, J., Klose, C., Surma, M. A., Almeida, M. S., Rodrigues, G., Gonçalves, P. A., Ferreira, J., Gouveia e Melo, R., Pedro, L. M., Simons, K., Pinho e Melo, T. M. V. D., Cabral, M. G., Jacinto, A., Silvestre, R., Vaz, W. L. C., Vieira, O. V., Cholestryl Hemiazelate Identified in Cardiovascular Disease Patients Causes in vitro and in vivo Inflammation, *J. Lipid. Res.*, 64(9), Art. N. 100419.
DOI: 10.1016/j.jlr.2023.100419

I31. Benzi, A., Lopes, S. M. M., Nunes, S. C. C., Giorgi, G., Bianchi, L., Tavani, C., Pais, A. A. C. 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, *Front. Chem. (section Organic Chemistry)*, 11, Art. N. 1229669, 2023.
DOI: 10.3389/fchem.2023.1229669.

I32. Alves, C., Sase, T. J., Gadelho, C., Murtinho, D., Serra, M. E. S., Cardoso, A. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., Organocatalysts for the Asymmetric Neber Reaction: Synthesis of Chiral 2-(Tetrazol-5-yl)-2H-Azirines, *ChemistrySelect*, 8, Art. N. e202302816, 2023.
DOI: 10.1002/slct.202302816

I33. Galindres, D. M., Espitia-Galindo, N., Valente, A. J. M., Sofio, S. P. C., Rodrigo, M. M., Cabral, A. M. T. D. P. V., Esteso, M. A., Zapata-Rivera, J., Vargas, E. F., Ribeiro, A. C. F., Interactions of Sodium Salicylate with β -Cyclodextrin and an Anionic Resorcin[4]arene: Mutual Diffusion Coefficients and Computational Study, *Int. J. Mol. Sci.*, 24, Art. N. 3921, 2023.
DOI: 10.3390/ijms24043921

I34. Musilová, L., Mráček, A., Azevedo, E. F. G., Valente, A. J. M., Cabral, A. M. T. D. P. V., Ribeiro, A. C. F., Esteso, M. A., Interactions Between Sodium Hyaluronate and β -Cyclodextrin as Seen by Transport Properties, *Int. J. Mol. Sci.* 24, Art. N. 2889, 2023.
DOI: 10.3390/ijms24032889

I35. 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., Esteso, M. A., Effect of Potassium Dihydrogen Citrate on the Diffusion Behaviour of Citric Acid, *J. Chem. Thermodyn.*, 179, Art. N. 106996, 2023.
DOI: 10.1016/j.jct.2022.106996

CQC – Overall Output Indicators 2023

- I36. Silva, E. C., Gomes, C. G., Pina, J., Pereira, R. F. P., Murtinho, D., Fajardo, A. R., Valente, A. J. M., Carbon Quantum Dots-containing Poly(β -cyclodextrin) for Simultaneous Removal and Detection of Metal Ions from Water, *Carbohydr. Polym.*, 323, Art. N. 121464, 2024.
DOI: 10.1016/j.carbpol.2023.121464
- I37. Burke, A. J., Update on Asymmetric Organocatalytic Approaches for Accessing Drugs, *Expert Opin. Drug Discovery*, 18(1), pp 37-46, 2023.
DOI: 10.1080/17460441.2023.2160437
- I38. Carreiro, E. P., Hermann, G. J., Burke, A. J., Federsel, H.-J., Continuous Flow Enantioselective Processes Catalysed by Cinchona Alkaloid Derivatives, *Tetrahedron Green Chem.*, 2, Art. N. 100025, 2023.
DOI: 10.1016/j.tgchem.2023.100025
- I39. Lopes, E., Machado-Oliveira, G., Simões, C. G., Ferreira, I. S., Ramos, C., Ramalho, J., Soares, M. I. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., Puertollano, R., Marques, A. R. A., Vieira, O. V., Cholesteryl Hemizelate Present in Cardiovascular Disease Patients Causes Lysosome Dysfunction in Murine Fibroblasts, *Cells*, 12, pp. 2826, 2023.
DOI: 10.3390/cells12242826
- I40. Bornes, C., Geraldes, C.F.G.C., Rocha, J., Mafra, L., Investigating Trimethylphosphine Oxide Interactions with Brønsted and Lewis Acid Sites in Zeolites: A Comparative Solid-State NMR Study of Wet-Phase and Gas-Phase Adsorption Techniques, *Microporous Mesoporous Mater.*, 360, Art. N. 112666, 2023.
DOI: 10.1016/j.micromeso.2023.112666
- I41. Chaves, O. A., Loureiro, R. J., Costa-Tuna, A., Almeida, Z.L., Pina, J., Brito, R.M., Serpa, C., Interaction of Two Commercial Azobenzene Food Dyes, Amaranth and New Coccine, with Human Serum Albumin: Biophysical Characterization, *ACS Food Sci. Technol.* 3, 955-968, 2023.
DOI: 10.1021/acsfoodscitech.3c00125
- I42. Cordeiro, M.M., Filipe, H.A.L., Santos, P.d., Samelo, J., Ramalho, J.P.P., Loura, L.M.S., Moreno, M.J., Interaction of Hoechst 33342 with POPC Membranes at Different pH Values, *Molecules*, 28, Art. N. 5640, 2023.
DOI: 10.3390/molecules28155640
- I43. Coreta-Gomes, F., Silva, I.M.V., Nunes, C., Marin-Montesinos, I., Evtuguin, D., Geraldes, C.F.G.C., Moreno, M.J., Coimbra, M.A., Contribution of non-ionic interactions on bile salt sequestration by chitooligosaccharides: Potential hypocholesterolemic activity, *J. Colloid Interface Sci.*, 646, 775-783, 2023.
DOI: 10.1016/j.jcis.2023.05.056
- I44. Cunha, A.E.S., Loureiro, R.J.S., Simões, C.J.V., Brito, R.M.M., Unveiling New Druggable Pockets in Influenza Non-Structural Protein I: NS1-Host Interactions as Antiviral Targets for Flu, *Int. J. Mol. Sci.*,

24, Art. N. 2977, 2023.
DOI: 10.3390/ijms24032977

145. Ferreira, M.J., Rodrigues, T.A., Pedrosa, A.G., Gales, L., Salvador, A., Francisco, T., Azevedo, J.E., The mammalian peroxisomal membrane is permeable to both GSH and GSSG – Implications for intraperoxisomal redox homeostasis, *Redox Biol.*, 63, Art. N. 102764, 2023.
DOI: 10.1016/j.redox.2023.102764

146. Filipe, H.A.L., Loura, L.M.S., Moreno, M.J., Permeation of a Homologous Series of NBD-Labeled Fatty Amines through Lipid Bilayers: A Molecular Dynamics Study, *Membranes*, 13, Art. N. 2023.
DOI: 10.3390/membranes13060551

147. Filipe, H.A.L., Moreira, A.F., Miguel, S.P., Ribeiro, M.P., Coutinho, P., Interaction of Near-Infrared (NIR)-Light Responsive Probes with Lipid Membranes: A Combined Simulation and Experimental Study, *Pharmaceutics*, 15, Art. N. 1853, 2023.
DOI: 10.3390/pharmaceutics15071853

148. Khalighi, S., Jalkh, J., Cruz, P.F., Brito, R.M.M., Santos, J.B., Ferreira, A.G.M., Influence of Pressure and Temperature in the Speed of Sound of Isobutanol + Biodiesel Mixtures, *J. Chem. Eng. Data*, 68, 1921–1939, 2023.
DOI: 10.1021/acs.jced.3c00217

149. Librando, I. L., Paul, A., Mahmoud, A.G., Gurbanov, A.V., Carabineiro, S.A.C., Guedes da Silva, M.F.C., Geraldes, C.F.G.C., Pombeiro, A.J.L., Triazaphosphadamantane- Functionalized Terpyridine Metal Complexes: Cyclohexane Oxidation in Homogeneous and Carbon-Supported Catalysis, *RSC Sustainability*, 1, 147–158, 2023.
DOI: <https://doi.org/10.1039/D2SU00017B>

150. Machado, F., Coimbra, M.A., del Castillo, M.D., Coreta-Gomes, F., Mechanisms of action of coffee bioactive compounds—a key to unveil the coffee paradox, *Crit. Rev. Food Sci. Nutr.* 2023.
DOI: 10.1080/10408398.2023.2221734

151. Mahmoud, A.G., Librando, I.L., Paul, A., Carabineiro, S.A.C., Ferraria, A. M., Botelho do Rego, A.M., Guedes da Silva, M.F.C., Geraldes, C.F.G.C., Pombeiro, A.J.L., Novel organotin-PTA complexes supported on mesoporous carbon materials as recyclable catalysts for solvent-free cyanosilylation of aldehydes, *Catal. Today*, 423, Art. N. 114270, 2023.
DOI: 10.1016/j.cattod.2023.114270

152. Moreno, M.J., Filipe, H.A.L., Cunha, S.V.P., Ramos, C.V., Martins, P.A.T., Abel, B., Loura, L.M.S., Ambudkar, S.V., Interaction of a Homologous Series of Amphiphiles with P-glycoprotein in a Membrane Environment. Contributions of Polar and Non-Polar Interactions, *Pharmaceutics*, 15, Art. N. 174, 2023.
DOI: 10.3390/pharmaceutics15010174

I53. Moreno, M.J., Salvador, A. Ligand's Partition to the Lipid Bilayer Should Be Accounted for When Estimating Their Affinity to Proteins, *Molecules*, 28, Art. N. 3136, 2023.
DOI:10.3390/molecules28073136

I54. Oliveira, A.C., Filipe, H.A.L., Loura, L.M.S., Fluorescent Probes *cis*- and *trans*-Parinaric Acids in Fluid and Gel Lipid Bilayers: A Molecular Dynamics Study, *Molecules*, 28, Art. N. 2241, 2023.
DOI: 10.3390/molecules28052241

I55. Pinto, S.M.A., Ferreira, A.R.R., Teixeira, D.S.S., Nunes, S.C.C., Batista de Carvalho, A.L.M., Almeida, J.M.S., Garda, Z., Pallier, A., Pais, A.A.C.C., Brett, C.M.A., Tóth, E., Marques, M.P.M., Pereira, M.M., Geraldes, C.F.G.C., Fluorinated Mn (III)/(II)-porphyrin with redox-responsive ¹H and ¹⁹F relaxation properties, *Chem. Eur. J.*, 29, Art. N. e202301442, 2023.
DOI: 10.1002/chem.202301442

I56. Silva, J. M., Cerofolini, L., Carvalho, A. L., Ravera, E., Fragai, M., Parigi, G., Macedo, A.L., Geraldes, C.F.G.C., Luchinat, C., Elucidating the concentration-dependent effects of thiocyanate binding to carbonic anhydrase, *J. Inorg. Biochem.*, 244, Art. N. 112222, 2023.
DOI: 10.1016/j.jinorgbio.2023.112222

Articles in National Peer-Reviewed Journals (8)

1. Utzeri, G., Murtinho, D., Valente, A. J. M., Dextrinas a Nanoesponjas: um Caminho de Éxito Trilhado pelas Ciclodextrinas, *Química*, 47, 172, 2023.
DOI: <https://doi.org/10.52590/M3.P707.A30002711>
2. Basso, J., Sousa, J., Vitorino, R., Fortuna, A. Vitorino, C. Otimização da Entrega de Fármacos com Transportadores Lipídicos Nanoestruturados no Glioblastoma. *Acta Farmacêutica Portuguesa*, 2023., (<https://actafarmaceuticaportuguesa.com/index.php/afp/article/view/381/287>)
3. Fausto, R., Pulsos de Luz Ultrarrápidos (Attosegundos): A Chave para a Investigação da Dinâmica dos Eletrões em Átomos, Moléculas e em Fase Condensada, *Bol. Soc. Port. Quím.*, 47, pp. 195-196, 2023.
DOI: 10.52590/M3.P708.A30002725
4. Alves, A.J.S., Macedo, J., Alves, C., Brito, A.L.B., Justino, L.L.G., Nunes, C.M., Lopes Jesus, A.J., Murtinho, D., Pineiro, M., Fausto, R., Pinho e Melo, T.M.V.D., Modificação das Propriedades da Colofónia: Contributo da Química Orgânica e Computacional, *Resinae*, 12, pp. 36-43, 2023.
DOI: N.A.
5. Viegas, L. P, Teoria do Estado de Transição ao Serviço da Química Verde, *Bol. Soc. Port. Quím.*, 46, 258-265 (2023).
6. Rodrigues, S.P.J., A Química do Amor”, *Boletim da SPQ* 47, 16 (2023).
7. Rodrigues, S.P.J., Pais, A., Pinho e Melo, Teresa, Cardoso, A.L.; Valente, A.J.M. António Jorge Andrade de Gouveia - Um Pedaço de Química Portuguesa, *Boletim da SPQ* 47, 22 (2023.)
8. C.F.G.C. Geraldes, Rare Earths: not so rare but many are critical, *Memórias da Academia de Ciências de Lisboa – Classe de Ciências*, XLIX, pp. 79-108, 2023.

Communications at International Meetings (136)

International Keynotes / Plenary / Invited Lectures (48)

1. Fausto, R., Non-covalent Interactions Relevance to Tunneling-driven and vibrationally-induced Chemistry under Matrix Isolation Conditions, 35th European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS 2023), Jyväskylä, Finlândia, Agosto 2023. **Plenary Lecture**
2. Fausto, R., Non-covalent Interactions Relevance to Tunneling-driven and vibrationally-induced Chemistry under Matrix Isolation Conditions, European Meeting on Physical Organic Chemistry – Understanding Noncovalent Intermolecular Interactions (EMPOC 2023), Bratislava, Polónia, Junho 2023. **Plenary Lecture**
3. Amado, P.S.M., Costa, I.C.C., Lopes, S., Brás, E.M., Takano, M., Abe, M., Fausto, R., Cristiano, M. L. S., Insights on the Structure and Photochemistry of Synthetic Compounds Bearing the Endoperoxide Pharmacophore, 19th European Symposium on Organic Reactivity (ESOR2023), Amsterdão, Países Baixos, Setembro 2023. **Plenary Lecture**
4. Valente, A. J. M., Gels for environmental remediation: from aerogels to nanosplices. 17th Brazilian Polymer Conference, Joinville, Santa Catarina, Brazil, October 29 to November 2, 2023. **Plenary Lecture**
5. Marques, J. M. C., Prudente, F. V., Guimarães, M. N., de Almeida, M. M., Thermodynamics of the microsolvation of Li⁺ by argon: effect of the potential on the features of the first and second solvation shells, 1st General Meeting of the COSY COST Action, Cádiz, Spain, 2023. **Invited Oral Communication**
6. Marques, J. M. C., Modeling microsolvation of ions: achievements and future perspectives, Southern European Conference on the Science of Molecules (SECSMol), Perugia, Italy, 2023. **Invited Oral Communication**
7. Ribeiro, A. C. F., Fangaia, S. I. G., Transport Properties of Pharmaceutical Compounds: Towards the minimization toxicological risks of cobalt, chromium and nickel alloys), IV Workshop of Basic Science. A new approach to engineering applications, Universidad de América, Bogota, Colombia, 2023. **Invited Oral Communication**
8. Campos, M. G., Fortuna, A., Cannabinoid Interactions with other Drugs on treatments for Chronic Diseases. Symposium Clearing the Smoke on Medical Cannabis. The importance of the endocannabinoid system in health and disease, University of Coimbra, Centre of Neurosciences. Portugal, March 9-10th, 2023. **Invited Oral Communication**
9. Campos, M. G., Canabinóides | Interações Medicamentosas: Farmacocinética e Farmacodinâmica. 2^a Conferência Nacional em Canabis Medicinal. Faculdade de Medicina, Universidade de Coimbra, Março 25, 2023 Portugal. **Invited Oral Communication**
10. Campos, M. G., As intoxicações mais frequentes devido ao consumo de plantas. XVI Congresso Científico do NEF – Toxicologia Forense. Auditório do Centro Hospitalar de Coimbra, Coimbra, Março 30-31. 2023. **Invited Oral Communication**
11. Valente, A. J. M., Cyclodextrin-Based Nanosplices as efficient matrices for pesticide removal. International Symposium “Priorities of Chemistry for a sustainable Development” (XIX PRIOCHEM), Bucharest, 11-13.10.2023. **Invited Lecture**
12. Valente, A. J. M., The amazing world of polyelectrolytes, Invited Lecture, I Workshop Polissacarídeos, INCT Polissacarídeos, Universidade Federal do Piauí, Teresina, Brasil, 26-27.10.2023. **Invited Lecture**
13. Marques, J. M. C., Prudente, F. V., Guimarães, M. N., de Almeida, M. M., Thermodynamics of the microsolvation of Li⁺ by argon: effect of the potential on the features of the first and second solvation

shells, 1st General Meeting of the COSY COST Action, Cádiz, Spain, 2023. **Invited Oral Communication**

14. Miranda, M., Vitorino, C., Tackling formulation complexity in bioequivalence assessment of topical generic products, EUFEPS Annual Meeting 2023, at the edge of Europe and Science, 31 de maio – 2 de junho de 2023, Faculty of Pharmacy, University of Lisbon, **Invited Oral Communication**

15. Luis G. Arnaut. "Lasers in the fight against Cancer". PHAST-ETN MT4 General Meeting, 9-10/05/2023, online de Leibniz (Alemanha). **Invited Lecture**

16. Luis G. Arnaut. "Photodynamic therapy and immune checkpoint blockers: How to work together". 20th Congress of the European Society for Photobiology, 27-31/08/2023, Lyon (França). **Invited Lecture**

17. Luis G. Arnaut. "How Small Photosensitizers Achieve Big Kills in Antimicrobial Photodynamic Therapy". 20th Congress of the European Society for Photobiology, 27-31/08/2023, Lyon (França). **Invited Lecture**

18. Lígia C. Gomes-da-Silva. "Photodynamic therapy and its immunoadjuvant properties for cancer treatment", European Cell Death Organization \$ European Academy of Tumor Immunology Joint Annual Conference, 28-30/06/2023, Paris (França). **Invited Lecture**

19. Lígia C. Gomes-da-Silva. "Photodynamic therapy using LUZ51, a carboxamide halogenated bacteriochlorin, combines efficient cell killing with anti-tumor immunity". 20th Congress of the European Society for Photobiology, 27-31/08/2023, Lyon (França). **Invited Lecture**

20. C. Serpa, "Company perspective: Photoacoustic generation and applications", Laserlab Europe Foresight Workshop on Future Laser-Based Technologies, 25 July 2023, Riga, Latvia. **Invited Lecture**

17. M.M. Pereira, Honoris Causa Lecture, "Catalytic Processes for Synthesis of Value-added Compounds: Medicinal Applications", 8/11/2023, University of Pécs, Hungary. **Invited Lecture**

21. R.M.B. Carrilho, "Transition Metal Catalysts for Small Gas Molecules Valorization", presented in the framework of Erasmus+ Mobility Portugal-Hungary Program, Staff Teaching Assignment (STA), June 2023, Department of Physical and Inorganic Chemistry, University of Pécs, Pécs (Hungary). **Invited Lecture**

22. M.M. Pereira, "CO in Modern Organic Synthesis - Sustainable Catalytic Flow Processes" presented in the framework of Erasmus+ Mobility Portugal-Hungary Program, Staff Teaching Assignment (STA), June 2023, Department of Physical and Inorganic Chemistry, University of Pécs, Pécs (Hungary). **Invited Lecture**

23. Amado, P.S.M., Costa, I.C.C., Lopes, S., Brás, E.M., Takano, M., Abe, M., Fausto, R., Cristiano, M. L. S., Insights on the Structure and Photochemistry of Synthetic Compounds Bearing the Endoperoxide Pharmacophore, 19th European Symposium on Organic Reactivity (ESOR2023), Amsterdão, Países Baixos, Setembro 2023. **Plenary Lecture**

24. Fausto, R., Magic Wands for Controlling Molecular Structure: Beyond the Chemical Reactivity Paradigms, İstanbul Kültür University (Department of Physics), Istambul, Turquia, Abril 2023. **Invited Lecture**

25. Fausto, R., Non-covalent Interactions Relevance to Tunneling-driven and vibrationally-induced Chemistry under Matrix Isolation Conditions, İstanbul Kültür University (Department of Physics), Istambul, Turquia, Julho 2023. **Invited Lecture**

26. Fausto, R., IR-induced and Tunneling Reactions in Cryogenic Matrices: The (Incomplete) Story of a Successful Endeavor, İstanbul Kültür University (Department of Physics), Istambul, Turquia, Julho 2023. **Invited Lecture**

27. Moreno M.J., Lipophilicity – How can it be measured?, BiFi, University of Zaragoza, Zaragoza, Spain, 25 May 2023. **Invited Lecture**

28. Moreno M.J., In vitro, in vivo & kinetic modelling, University of Chemistry and Technology, Prague, Czechia, 15 June 2023. **Invited Lecture**
29. Fausto, R., Infrared-Induced and Tunnelind-Driven Reactions in Cryogenic Matrices, Universidad Autónoma de Madrid (Centro de Micro-Análisis de Materiales), Madrid, Espanha, Dezembro 2023. **Invited Lecture**
30. Ildiz, G.O., Fausto, R., IR and Raman Spectroscopies for the Complementary Diagnosis of Psychiatric and Neurodevelopmental Disorders, 35th European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS 2023), Jyvaskyla, Finlândia, Agosto 2023. **Invited Oral Communication**
31. Roque, J. P. L., Nunes, C. M., Fausto, R., Exploring Quantum Tunneling in Organic Reactions, XVII Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER 2023), Coimbra, Setembro 2023. **Invited Oral Communication**
32. Nunes, C. M., Manipulation of Organic Molecules by Infrared Vibrational Excitation, 28th National Meeting of the Portuguese Chemical Society (28th ENSPQ), Aveiro, Portugal, 2023. **Invited Keynote Lecture**
33. Nunes, C. M., Quantum Tunneling Reactions: Discoveries on the Slippery PES of Arylnitrenes”, Solvation Chemistry and Reactive Molecules (WE-Heraeus-Seminar), Bad Honnef, Germany, 2023. **Plenary Lecture**
34. Eusébio, M.E.S., Thermal analysis in the investigation of the solid state of organic compounds. Porto School on Calorimetry and Thermal Analysis, MEDICTA 2023, 16th Mediterranean Conference on Calorimetry and Thermal Analysis, Porto, Portugal, 2023. **Plenary Lecture**
35. Castro, R.A.E., Solid-state of active pharmaceutical ingredients: The role of thermal analysis, MEDICTA 2023, 16th Mediterranean Conference on Calorimetry and Thermal Analysis, Porto, Portugal, 2023. **Keynote Lecture**
36. Varandas, A.J.C., Attitudinal Green Computing: Accurate Quantum Calculations via Extrapolation, Autumn Meeting 2023, Brazilian Physical Society, Ouro Preto, Brazil, 2023. **Plenary Lecture**
37. Varandas, A.J.C., Attitudinal Green Computing: The Dead End of Brute-Force Ab Initio Computations, Symposium Hot Topics Science, La Habana 2023. **Plenary Lecture**
38. Varandas, A.J.C., Attitudinal Green Computing in Molecular Structure & Dynamics: Tiling for Size, Extrapolation for Accuracy, Structure and Dynamics: Spectroscopy and Scattering (SDSS-2023), India, 2023. **Plenary Lecture**
39. Varandas, A.J.C., Attitudinal Green Computing in Molecular Physics: Tiling for Size, Extrapolation for Accuracy, II Encontro Capixaba de Física, Vitória, Brasil, 2023. **Plenary Lecture**
40. Caridade, P.J.S.B, Workshop on S2CP platform: Analyse your Lab with data, Lab Festival, Haarlem, Holland, 2023. **Workshop & Lecture.**
41. Rodrigues, S.P.J., Poluição Plástica, Semana do Meio Ambiente 2023 IFMS - Campus Campo Grande, Brasil (2023). **Lecture**
42. Pinho e Melo, T. M. V. D., Organic Chemistry in the Discovery of New Biologically Active Compounds. Webinar - “Highlighting Organic Chemistry in Portugal”, EuChemS - European Chemistry Society, Division of Organic Chemistry, online, 22/10/2023. **Invited Lecture**
43. Burke, A. J., Seeking Modularity and Diversity using Catalytic Multicomponent Reactions. Webinar - “Highlighting Organic Chemistry in Portugal”, EuChemS - European Chemistry Society, Division of Organic Chemistry, online, 23/10/2023. **Invited Lecture**

44. Pinho e Melo, T. M. V. D., Innovative Chemistry Toward Novel Tetrapyrrolic Macrocycles: Photodynamic Therapy and Imaging of Cancer, International Symposium on Synthesis and Catalysis (ISySyCat2023), Évora, Portugal, 5-8/09/2023. **Plenary Lecture**
45. Pinho e Melo, T. M. V. D., Innovative Chemistry Toward Novel Tetrapyrrolic Macrocycles: Photodynamic Therapy and Imaging of Cancer, The 19th Annual Congress of International Drug Discovery Science and Technology, Tokyo, Japan, 08-10/5/2023. **Invited Lecture**
46. Burke, A. J., Applications of Cinchona OrganoCatalysts in Asymmetric Catalysis, Nordic-Irish Process Chemistry Forum (NIPCF), Belfast, Irlanda do Norte, 6-8/06/2023. **Plenary Lecture**
47. Geraldes, C.F.G.C., Molecular Imaging Agents: PET/SPECT vs MRI: Has MRI a chance? NOAR: 2nd open meeting COST Action CA19114, Coimbra, Portugal, 9-11th May 2023. **Invited Lecture**
48. Moreno M.J., The role(s) of the lipid bilayer in ligand's affinity to membrane proteins, BiFi, University of Zaragoza, Zaragoza, Spain, 24 May 2023. **Invited Lecture**

International Oral Presentations (56)

1. Santos, J. R. C., Abreu, P. E., Marques, J. M. C., *Unveiling the aggregation patterns of curcumin and piperine mixtures in different polar media: a molecular dynamics investigation*, XVII Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics, Coimbra, Portugal, 2023. **Oral Presentation**
2. Marques, J. M. C., Santos, J. R. C., Abreu, P. E., *Aggregation of curcumin and piperine in a mixture of water and ethanol by molecular dynamics simulations*, 2nd Working Group 3 Virtual Symposium of COSY COST Action, online, 2023. **Oral Presentation**
3. Santos, J. R. C., Abreu, P. E., Marques, J. M. C., *Exploring the interaction of imidacloprid with the acetylcholine-binding protein by docking and molecular dynamics*, 2nd Working Group 3 Virtual Symposium of COSY COST Action, online, 2023. **Oral Presentation**
4. Abreu, P. E., 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., Pais, A. A. C. C., *Reaction of Corroles with Sarcosine and Paraformaldehyde: a semi-empirical study*, 15º Encontro Nacional de Química Física (online), 4-5 Abril 2023. **Oral Presentation**
5. Santos, C.I.A.V., Bou-Ali, M.M., Mialdun, A., and Shevtsova, V., *Separation stability in binary TEG-water mixtures observed by digital interferometry*, 15th International Meeting on Thermodiffusion (IMT15), Spain, May 2023. **Oral Presentation**
6. Cova, T.F., Utzery, G., Nunes, S., Vitorino, C., Pais, A., Valente, A., *Cyclodextrin complexes: computational insights into structure and recognition behavior for enhanced pharmaceutical and environmental applications*, XXVII Encontro Luso Galego de Química -Fundação Dr. António Cupertino de Miranda, Porto, Portugal, novembro 2023. **Oral Presentation**
7. Nunes, S. C.C., Veríssimo, B.C., Duarte, A.C.L., Mendes, M., Vitorino, C., Cova, T.F., Pais, A.A.C.C., *How simple models in Monte Carlo simulations can complement and expand the knowledge of Biomolecule-Based Drug Delivery Systems*, XXVII Encontro Luso Galego de Química -Fundação Dr. António Cupertino de Miranda, Porto, Portugal, novembro 2023. **Oral Presentation**

8. Nunes, S. C.C., Veríssimo, B.C., Duarte, A.C.L., Mendes, M., Vitorino, C., Cova, T.F., Pais, A.A.C.C., *Efficient models for Monte Carlo simulations applied to different biomolecules-based drug delivery systems*, I International Meeting Molecules 4 Life - UTAD, Vila Real,

Portugal, setembro 2023. **Oral Presentation**

9. Mendes, M., Sereno, J., António, M., Daniel-da-Silva, A.L., Cova, T., Nunes, S., Ramos, M.L., Castelo-Branco, M., Sousa, J., Pais, A., Vitorino, C., *Addressing hard-to-access brain tumors using a chemo-photothermal nanotechnology*, I International Meeting Molecules 4 Life - UTAD, Vila Real, Portugal, setembro 2023. **Oral Presentation**

10. Cova, T.F., Mendes, M., Nunes, S., Vitorino, C., Pais, A., *Breaking Through the Blood-Brain Barrier: The Synergy of Machine Learning and Molecular Simulations in Designing Cell-Penetrating Peptides for Glioblastoma Nanoparticle Therapy*, I International Meeting Molecules 4 Life - UTAD, Vila Real, Portugal, setembro 2023. **Oral Presentation**

11. Nunes, S. C.C., Veríssimo, B.C., Duarte, A.C.L., Mendes, M., Vitorino, C., Cova, T.F., Pais, A.A.C.C., *Electrostatics and biomolecules-based drug delivery systems*, XXVIII Encontro Nacional da SPQ, Aveiro, Portugal, Julho 2023. **Oral Presentation**

12. Pinto, S. M. A., Ferreira, A. R. R., Teixeira, D. S. S., Nunes, S. C. C., Batista de Carvalho, A. L. M. , Almeida, J. M. S., Garda, Z., Pallier, A., Pais, A. A. C. C., Brett, C. M. A., Tóth, É., Marques, M. P. M. , Pereira, M. M., Geraldes, C. F. G. C., *Fluorinated Mn(III)/(II)-porphyrin with redox-responsive ¹H and ¹⁹F relaxation properties*, XXVIII Encontro Nacional da SPQ, Aveiro, Portugal, Julho 2023. **Flash communication**

13. Mendes, M., Basso, J., Sereno, J., António, M., Daniel-da-Silva, A.L., Cova, T., Nunes, S., Ramos, M.L., Fortuna, A., Castelo-Branco, M., Falcão, A., Sousa, J., Pais, A., Vitorino, C., *Advancing brain tumor therapy with solid lipid nanoparticles*, XXVIII Encontro Nacional da SPQ, Aveiro, Portugal, Julho 2023. **Flash communication**

15. Trigo-López, M., Miguel, A., García, J. M., Ventosa, E. , Ruiz, V., Valente, A. J. M., Vallejos, S. Customizable porosity and electrical conductivity of carbon materials through pyrolyzed aramids (Pyramids). XXV Meeting of the Portuguese Electrochemical Society. Coimbra, 30.08-01.09, 2023. **Oral Presentation**

16. Silva, E. C., Gomes, C. G., Pina, P., Valente, A. J. M., Fajardo, A., “B-CYCLODEXTRIN FUNCTIONALIZED WITH CARBON QUANTUM DOTS AS ADSORBENT SENSORS OF METALLIC SPECIES IN AQUEOUS ENVIRONMENTS”, 17th Brazilian Polymer Conference, Joinville, Santa Catarina, Brazil, October 29 to November 2, 2023. **Oral Presentation**

17. Mendes, M., António, M., Daniel-da-Silva, A. L., Oliveira, R., Ramos, M.L., Gomes, C. M., Sereno, J., Castelo-Branco, M., Sousa, J.J., Pais, A.A.C.C, Vitorino, C., *A multifunctional hybrid-nanoparticle for GB chemophotothermal synergistic therapy*, 4th SPLC-CRS Young Scientists Meeting, Delivering Science, Bridging Opportunities, 1 a 6 de fevereiro de 2023, Porto, **Short-communication**

18. Vitorino, C., *Nanoparticle Precision: Improving Glioblastoma Outcomes through Surface-Conjugated Ultra-Small Lipid Carrier Delivery*, TRANSLACORE COST meeting, 20 de março de 2023, Lisbon, **Oral Presentation**.

19. ▼Basso, J., Sousa, J., Vitorino, R., Fortuna, A. Vitorino, C. *Breaking Barriers: optimizing drug delivery in glioblastoma with nanostructured lipid carriers*. X Iberoamerican Congress of Pharmaceutical Sciences, Coimbra, Portugal, 26 – 28th October, 2023. **Oral Presentation**. ▼ **Prémio de melhor comunicação oral em Tecnologia e Biotecnologia Farmacêutica**.

20. Chiarentin L., Vitorino, C., Towards the development and optimization of a rheology method for a high viscosity cream: An Analytical Quality by Design (AQbD) approach. "Skin & Formulation, 6th Symposium – Current challenges in skin formulation" in Nantes-France on the 2&3 October 2023. **Oral Presentation**
21. Luis G. Arnaut. "Photodynamic Therapy of Advanced Head and Neck Cancer with Redaporfin: Phase IIa Clinical Trial Results". Luis G. Arnaut. 18th IPA World Congress, 10-15/07/2023, Tampere (Finlândia). **Oral Communication**
22. Diogo A. Pereira. "Photoacoustic priming and photodynamic therapy of solid tumors". 18th IPA World Congress, 10-15/07/2023, Tampere (Finlândia). **Oral Communication**
23. Maria Inês P. Mendes. "Photodynamic therapy with redaporfin activated by pulsed laser light". 18th IPA World Congress, 10-15/07/2023, Tampere (Finlândia). **Oral Communication**
24. Lígia C. Gomes-da-Silva. "LUZ51: a low molecular weight carboxamide halogenated bacteriochlorin for the treatment of highly aggressive tumors". 18th IPA World Congress, 10-15/07/2023, Tampere (Finlândia). **Oral Communication**
25. Mafalda Penetra. "Determining how LUZ51 permeates through cellular membranes". 18th IPA World Congress, 10-15/07/2023, Tampere (Finlândia). **Oral Communication**
26. Anita Amorim. "Use of a cationic di-imidazolyl chlorin for antimicrobial photodynamic therapy". 18th IPA World Congress, 10-15/07/2023, Tampere (Finlândia). **Oral Communication**
27. Eduardo Costa. "Life-cycle of a medicine". Curso de Formação Avançada – Translating nanomedicines: Principles of nanomedicines R&D (Módulo I), 11-15 December 2023, Faculty of Pharmacy, University of Lisbon, Portugal. **Oral Communication**
28. Mariette M. Pereira "Synthesis of PDT-driven tetrapyrrolic based photosensitizers: Challenges and opportunities", 18th IPA World Congress, 10-15/07/2023, Tampere (Finlândia). **Oral Communication**.
29. R.T. Aroso, M. M. Pereira "With a little help from our antibiotic friends: synergic dual phototherapy for inactivation of gram-negative bacteria", 18th IPA World Congress, 10-15/07/2023, Tampere (Finlândia). **Oral Communication**.
30. R.T. Aroso, M.F.C. Silva, M.M.Pereira, "Antimicrobial photodynamic therapy combined with antimicrobials: an alternative approach for eradication of gram-negative bacteria" 10th EFMC Young Medicinal Chemists' Symposium (EFMC-YMCS), 07/10/2023-08/10/2023 Zagreb, (Croatia). **Oral Communication**.
31. R.T. Aroso, M.M. Pereira, "With a little help from our antibiotic friends: synergic dual phototherapy for inactivation of gram-negative bacteria" 18th IPA World Congress, 10-15/07/2023, Tampere (Finlândia). **Oral Communication**.
32. R.M.B. Carrilho, I.G. Cruz, A.F. Peixoto, F.S. Ferreira, J.M. Gil, M.M. Pereira, "Biomass-derived carbonaceous materials as renewable catalysts for carbon dioxide fixation into cyclic carbonates", The World Conference on Carbon 2023, July 2023, Cancun (Mexico). **Oral Communication**.
33. Baptista, J.A., Castro, R.A.E., Canotilho, J., Ciattini, S., Santos, J.C., Marques, J.M.C., Rosado, M.T.S., Eusébio, M.E.S., Experimental and computational investigation of polymorphs and solvates of probucol, JEEP 2023, Journées d'Etude des Equilibres entre Phases, Rouen, France, 2023. **Oral Presentation**
34. Baptista, J.A., Rosado, M.T.S., Castro, R.A.E., Canotilho, J., Fantechi, E., Chelazzi, L., Ciattini, S., Eusébio, M.E.S., Unambiguous identification of different API crystalline phases: thermal analysis to the rescue - two case studies, MEDICTA 2023, 16th Mediterranean Conference on Calorimetry and Thermal Analysis, Porto, Portugal, 2023. **Oral Presentation**

35. Almeida, A.C., Ferreira, P.O., Canotilho, J., Castro, R.A.E., Eusébio, M.E.S., Caires, F.J., *Thermal analysis as a tool to prospect novel nimesulide dual-drug solid forms*, MEDICTA 2023, 16th Mediterranean Conference on Calorimetry and Thermal Analysis, Porto, Portugal, 2023. **Oral Presentation**
36. Almeida, A.C., Ferreira, P.O., Castro, R.A.E., Canotilho, J., Eusébio, M.E.S., Caires, F.J., *Synthesis and characterization of nimesulide dual-drug co-amorphous systems*, YoungMultis 2023, Multiscale Phenomena in Condensed Matter, Kraków, Poland, online, 2023. **Oral Presentation**
37. Silva, J.F.C., Pereira Silva, P.S., Ramos Silva, M., Fantechi, E., Chelazzi, L., Ciattini, S., Eusébio, M.E.S., Rosado, M.T.S., *Relaxation pathways from amorphous to crystals: thermal and kinetic stability of ranolazine/tryptophan high-energy solid forms*, YoungMultis 2023, Multiscale Phenomena in Condensed Matter, Kraków, Poland, online, 2023. **Oral Presentation**
38. Freitas, V.L.S., Mbelela, N.M.C.C., Castro, R., Ribeiro da Silva, M.D.M.C., *Thermophysical Characterization of Anthraquinone Derivatives: A Comprehensive Study*, JEEP 2023, Journées d'Etude des Equilibres entre Phases, Rouen, France, 2023. **Oral Presentation**
39. Roque, J.P.L., Nunes, C.M., Viegas, L.P., Doddipatla, S., Wood, S.A., McMahon, R.J., Fausto, R., *Simultaneous Tunneling Control in Conformer-Specific Reactions*, Thematic School “Vibrational and Electronic Spectroscopies Applied to the Study of Reaction Mechanisms (MECAREACT)”, Paris, França, Junho 2023. **Oral Presentation**
40. Alcaria, R., Bordel, B., Machalek, A., Caridade, P.J.S.B., *CRFS BLOCKCHAIN: Single Click CRFS Platform*, CITIES2030: General Assembly, Amsterdam, Holland, 2023. **Oral communication**.
41. Rodrigues, S.P.J., Peres, M., *Contributions to the History of Chemistry During the First Romantic Period in Portugal*, International Conference on the History of Chemistry – ICHC2023, Vilnius, Lituânia, 2023. **Oral communication**.
42. Rodrigues, S.P.J., *De Percursos a Passeios Químicos: Análise de Mais de Dez Anos de Evolução*, SciCom: Transformar, Bragança, Portugal (2023). **Oral communication**.
43. Rodrigues, S.P.J., *Quatro personagens em evolução à procura da ciência do seu Tempo*, Colóquio Internacional Figuras da Ficção 6, Coimbra, Portugal (2023). **Oral communication**.
44. Rodrigues, S.P.J. *Evolução e didática de grandes ideias em Química (5.º curso de formação de professores em História da Ciência no Ensino)*, 3.º Congresso Internacional de História da Ciência no Ensino, Faro, Portugal (2023). **Oral communication**.
45. Rodrigues, S.P.J., *Passeio Químico nos Passadiços do Mondego*, Encontro Nacional da Associação Portuguesa de Professores de Física e Química, Guarda, Portugal (2023). (atividade formativa para todos os professores presentes) **Oral communication**.
46. Caridade, P.J.S.B., Rodrigues, S.P.J., *Evolução do cálculo das propriedades atómicas a partir de primeiros princípios*, Em Múltiplas facetas na história da ciência química, atas do II Encontro Nacional de História da Química da SPQ, Malaquias, I., Oliveira, J., Ferraz-Caetano, J. (Coords.), Aveiro, Portugal (2023), pp. 89-93. **Oral communication**.
47. Lamanna, R., Martins, D.R., Casaleiro, P., Rodrigues, S.P.J., *Produção e divulgação de uma banda desenhada sobre a história da espectroscopia de RMN na Universidade de Coimbra*. Em Múltiplas facetas na história da ciência química, atas do II Encontro Nacional de História da Química da SPQ, Malaquias I., Oliveira, J., Ferraz-Caetano, J. (Coords.), Aveiro, Portugal (2023), pp. 109-113. **Oral communication**.
48. Cardoso, A. L., Pineiro, M., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Sustainability Meets Structural Diversity: Exploring the Furan-based Chemical Space*, International Symposium on Synthesis and Catalysis (ISySyCat2023), Évora, Portugal, 5-8/09/2023. **Oral Presentation**
49. Alves, A. J. S., Gonçalves, J. V. R., Silvestre, J. A. D., Bártolo, I., Taveira, N., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Batch and Continuous Flow Synthesis of Novel Spiro- β -Lactams with Antiviral Activity*, International Symposium on Synthesis and Catalysis (ISySyCat2023), Évora, Portugal, 5-8/09/2023. **Oral Presentation (Flash)**

CQC – Overall Output Indicators 2023

50. Chiaffarelli, R., Jurek, P., Cruz, P.F., Zimmermann, M., Geraldes, C.F.G.C., Kiefer, G., Martins, A.F., *Imaging Extracellular Lactate using Lanthanide-PCTA-based paraCEST Agents*, 18th European Molecular Imaging (ESMI) Meeting, 14-17 March 2023, Salzburg, Austria. **Oral Presentation**
51. Chiaffarelli, R., Jurek, P., Cruz, P.F., Zimmermann, M., Geraldes, C.F.G.C., Kiefer, G., Martins, A.F., *Imaging Extracellular Lactate using Lanthanide-PCTA-based paraCEST Shift Reagents*. ISMRM & ISMRT Annual Meeting, 3-8 June 2023, Toronto, Canada. **Oral communication**
52. Coreta-Gomes, F., Moreno, M.J., Nunes, C., Coimbra, M.A., *Chitooligosaccharides hypocholesterolemic activity: relevance of ionic and non-ionic interactions*, EPNOE 2023, 17–22 September 2023, Graz University of Technology, Austria. **Oral communication**
53. Machado, F., Gómez-Domínguez, I., Hurtado-Ribeira, R., Martin, D., Coimbra, M.A., Del Castillo, M.D., Coreta-Gomes, F., *Colonic Fermentation of Coffee Melanoidins and Resulting Cardioprotective Metabolites*, International Coffee Convention, 30 September-3 October 2023, Mannheim, Germany. **Oral communication**
54. Machado, F., Laronha, H., Coelho, E., Nunes, C., Coimbra, M.A., Coreta-Gomes, F., *Polysaccharides hypocholesterolemic potential: from structure to function*, XXII Congress, EuroFoodChem XXII, 14-16 June 2023, Belgrade, Serbia. **Oral communication**
55. Machado, F., Nunes, C., Coimbra, M.A., Coreta Gomes, F., *Polysaccharides as hypocholesterolemic food ingredients*, 14th International Meeting of the Portuguese Carbohydrate Group, 16-18 January 2023, Caparica, Portugal. **Oral communication**
56. 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?*, 9th European Biophysics Congress EBSA2013, 31 July-4 August 2023, Stockholm, Sweden. **Oral communication**

International Posters (32)

1. Santos, J. R. C., Abreu, P. E., Marques, J. M. C., *Aggregation of curcumin and piperine mixtures in different polar media investigated by molecular dynamics simulations*, Cluster Meeting, Prague, Czech Republic, 2023. **Poster**
2. Santos, J. R. C., Abreu, P. E., Marques, J. M. C., *Exploring the interaction of imidacloprid with the acetylcholine-binding protein from Aplysia californica by employing computational techniques*, COSY COST Training School – Multiscale modeling of the properties of compounds: From isolated molecules to 3D materials relevant for industrial and astrophysical applications, Belgrade, Serbia, 2023. **Poster**
3. Esteso, M. A., 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., *Coupled mutual diffusion in aqueous potassium dihydrogen citrate plus citric acid solutions*, 38Th International Conference on Solution Chemistry (38ICSC), Belgrade, Serbia, 2023. **Poster**
4. Araújo, J., Carmo, C., Pereira, L. C. J., Sobral, A. J. F. N., *Functionalized Magnetic Iron Oxide/Glycine Imines Nanoparticles for Magnetic Hyperthermia Therapy*; 13th Joint European Magnetism Symposia (JEMS), Madrid, Aug 27 – Sep 1, 2023. **Poster**
5. Miron, A., Neblea, I., Dolana, S., Zaharia, A., Gavrila, A.-M., Valente, A. J. M., Iordache T.-V., Chiriac, A.-L., *Advanced Adsorbent materials for remediation of contaminated waters with heavy metals by enhanced adsorption mechanisms*, International Symposium “Priorities of Chemistry for a sustainable Development” (XIX PRIOCHEM), Bucharest, 11-13.10.2023. **Poster**

6. Basso, J., Fortuna, A., Vitorino, R. & Vitorino, C. Drug and Gene Delivery in Glioblastoma: Friends or Foes?, Delivery of RNA Therapeutics, Final DARTER Meeting, Bilbao, Spain, 22th - 24th February, 2023. **Poster**
7. Basso, J., Mendes, M., Cova, T., Nunes, N., Sousa, J., Pais, A. & Vitorino, C. Solid Lipid Based Nanoparticles for Drug Delivery, Delivery of RNA Therapeutics, Final DARTER Meeting, Bilbao, Spain, 22th - 24th February, 2023. **Poster**
8. Henriques, P., Silva, D., Miranda, M., Vitorino, C., Saldanha, S., Costa, E., Fortuna, A., Doktorovová, S., *In Vitro Methodologies for the Screening of Nasal Powders: Polymer-based Formulations, Respiratory Drug Delivery (RDD) conference*, Nice, 2 a 5 de maio de 2023. **Poster**
9. Mendes, M., António, M., Daniel-da-Silva, A.L., Oliveira, R., Ramos, M. L., Sereno, J., Castelo-Branco, M., Sousa, J.J., Pais, A.A.C.C., Vitorino, C., A multifunctional hybrid-nanoparticle for GB chemo-photothermal synergistic therapy, EUFEPS Annual Meeting 2023, at the edge of Europe and Science, Faculty of Pharmacy, University of Lisbon, 31 de maio a 2 de junho de 2023. **Poster**
10. Rafael Lopes, João Requicha, Nuno Carolino, Eduardo Costa, Pedro Carvalho, *Knowledge and future perspectives of companion animals' practitioners about cell-based therapies: a questionnaire-based survey in Portugal*. ETRS&SPCE-TC Joint Meeting, Coimbra, 2023. **Poster**
11. A. C. S. Gonzalez, I. G. Cruz, R.T. Aroso, R.M. B. Carrilho, M. M. Pereira, *Homogeneous versus Heterogeneous Catalysts in CO₂ Addition Reactions to Epoxides*, IsySyCat, 5-8 September 2023, Évora, Portugal. **Poster.**
12. M.F.C. Silva, R.T. Aroso, Z.A. Arnaut, J.M. Dabrowski, B. Pucelik, A. Barzowska, G. J. da Silva, L. G. Arnaut, M. M. Pereira, “*Structure-activity studies of di-cationic imidazolyl porphyrins for PDI of E. coli*”, 18th IPA World Congress, 10-15/07/2023, Tampere (Finlândia). **Poster.**
13. Baptista, J.A., Rosado, M.T.S., Castro, R.A.E., Canotilho, J., Fantechi, E., Chelazzi, L., Ciattini, S., Eusébio, M.E.S., *Polymorphs and solvates - isostructural forms of probucol*, 12th Crystal Forms Convention: The Growing World of Crystal Forms, Bologna, Italy, 2023. **Poster**
14. Costa, G.P., Almeida, A.C., Ferreira, P.O., Castro, R.A.E., Eusébio, M.E.S., Caires, F.J., *Discovery of a NOR-PABA salt through the coamorphous thermal conversion*, MEDICTA 2023, 16th Mediterranean Conference on Calorimetry and Thermal Analysis, Porto, Portugal, 2023. **Poster**
15. Ferreira, P.O., Almeida, A.C., Ferreira, L.T., Eusébio, M.E.S., Castro, R.A.E., Caires, F.J., *The influence of water in the crystallization of valsartan and naringenin coamorphous*, YoungMultis 2023, Multiscale Phenomena in Condensed Matter, Kraków, Poland, online, 2023. **Poster**
16. Serambeque, B., Carvalho, M. J., Correia-Barros, G., Pereira, N. A. M., Gonçalves, A. C., Pineiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., Laranjo, M., *Exploring Ring-fused Chlorins Based Photodynamic Therapy as a Conservative Approach for Endometrial Cancer*, EACR 2023 - Innovative Cancer Science, Torino, Italy, 10-15/06/2023. **Poster**
17. Gonçalves, A. C., Ribeiro, I., Marto, C. M., Serambeque, B., Pineiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., Laranjo, M., *Ring-fused Chlorins are Effective Photosensitizers for Oral Squamous Cell Carcinoma Treatment*, EACR 2023 - Innovative Cancer Science, Torino, Italy, 10-15/06/2023. **Poster**
18. Costa, B. D. P., Simões, J. C. S., Lopes, S. M. M., Laranjo, M., Botelho, M. F., Rodrigues, A. C. B., Seixas de Melo, J. S., Pineiro, M., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Hydrazone-Functionalized trans-A2B-Corroles: Novel Potent Photosensitizers for Photodynamic Therapy of Lung Cancer*, 57th Edition of the International Conference on Medicinal Chemistry (RICT 2023), Lille, France, 5-7/07/2023. **Poster**

19. Mata, A. I., Cardoso, A. L., Pineiro, M., Schaberle, F. A., Gomes-da-Silva, L. C., Brito, R. M. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Novel Foscan®-derived Ring-Fused Chlorins for Photodynamic Therapy of Cancer*, 57th Edition of the International Conference on Medicinal Chemistry (RICT 2023), Lille, France, 5-7/07/2023. **Poster**
20. Costa, B. D. P., Rodrigues, A. C. B., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., Botelho, M. F., Lopes, S. M. M., Laranjo, M., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Novel Corrole-based Photosensitizers for Photodynamic Therapy Ofnendometrial Cancer*, International Symposium on Synthesis and Catalysis (ISySyCat2023), Évora, Portugal, 5-8/09/2023. **Poster**
21. Amorim, A. C., Gomes, H., Ramalho, J. P. P., Burke, A. J., *Unveiling the Potential of Phthaloperinones as Active Optoelectronic Compounds for Electronic Devices*, International Symposium on Synthesis and Catalysis (ISySyCat2023), Évora, Portugal, 5-8/09/2023. **Poster**
22. Silva-Santos, E., F. Teixeira, F., Burke, A. J., Cordeiro, M. N. D. S., *Imine Hydrosilylation: A Theoretical Validation Through Experimental Results*, International Symposium on Synthesis and Catalysis (ISySyCat2023), Évora, Portugal, 5-8/09/2023. **Poster**
23. Costa, M., Brandão, P., Pineiro, M., *Mechanochemistry for the Transformation of Furanes through Multicomponent Reaction Catalysed by Zn*, International Symposium on Synthesis and Catalysis (ISySyCat2023), Évora, Portugal, 5-8/09/2023. **Poster**
24. Almeida, Z.L., Brito, R.M.M., “Removal of aberrant aggregates in amyloid diseases: from in silico analysis to in vitro biological activity”, ACS Publications Symposium: Biological and Medicinal Chemistry, 6-8 March 2023, Bonn, Germany. **Poster**
25. De Paiva V., Pires C.L., Almeida Z.L., Cruz P.F., Samelo J., Brito R.M.M., Moreno M.J., “Estimation of drug plasma protein binding using isothermal titration calorimetry and binding to albumin hydrogels”, ACS Publications Symposium: Biological and Medicinal Chemistry, 6-8 March 2023, Bonn, Germany. **Poster**
26. Geraldes, 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”, 18th European Molecular Imaging (ESMI) Meeting, 14-17 March 2023, Salzburg, Austria. **Poster**
27. Griffith, M., Araújo, A., Travasso, R., Salvador, A. “How sensitive and site-specific H₂O₂ signaling can be achieved in human cells: spatially localized redox relays”, 9th European Biophysics Congress EBSA2013, 31 July-4 August 2023, Stockholm, Sweden. **Poster**
28. Laronha, H., Coreta-Gomes, F., Coimbra, M.A., Coelho, E., “Extraction and characterization of polysaccharides present in wild endogenous mushroom species”, 14th International Meeting of the Portuguese Carbohydrate Group, 16-18 January 2023, Caparica, Portugal. **Poster**
29. Morán-Lalangui, M., Coutinho, A., Prieto, M., Pérez-Gil, J., Loura, L.M.S., García-Alvarez, B., “FRET studies of the Pulmonary Surfactant protein C (SP-C): oligomer stoichiometry and protein-protein interactions”, 9th European Biophysics Congress EBSA2013, 31 July-4 August 2023, Stockholm, Sweden. **Poster**
30. Moreno M.J., Filipe H.A.L., Cunha S.V.P., Ramos C., Martins P.A.T., Abel B., Loura L.M.S., Ambudkar S.V., “Interaction of a homologous series of amphiphiles with P-glycoprotein in a membrane environment: Contributions of polar and non-polar interactions”, 9th FEBS Special Meeting on ABC Proteins - ABC2023, 26 February-3 March 2023, Innsbruck, Austria. **Poster**
31. Moreno M.J., Filipe H.A.L., Cunha S.V.P., Ramos C., Martins P.A.T., Abel B., Loura L.M.S., Ambudkar S.V., “Interaction of a homologous series of amphiphiles with P-glycoprotein in a membrane environment: Contributions of polar and non-polar interactions”, 9th European Biophysics Congress EBSA2013, 31 July-4 August 2023, Stockholm, Sweden. **Poster**
32. Pires C.L., Batista de Carvalho A.L.M., Ferreira L., Marques M.P.M., Moreno M.J., “Re-use of Caco-2 monolayers in permeability assays – validation regarding cell monolayer integrity, biochemistry, and

CQC – Overall Output Indicators 2023

function”, ACS Publications Symposium: Biological and Medicinal Chemistry, 6-8 March 2023, Bonn, Germany. **Poster**

Communications at National Meetings (115)

National Keynotes / Plenary / Invited Lectures (19)

1. Seixas de Melo, J. Sérgio, *Indigo and tryptanthrin derivatives as active materials in aqueous-organic redox flow batteries*, XXV Meeting of the Portuguese Eletrochemical Society, Coimbra, 2023. **Invited Lecture**
2. Mendes, M., Basso, J., Sereno, J., António, M., Daniel-da-Silva, A.L., Cova, T., Nunes, S., Ramos, M.L., Fortuna, A., Castelo-Branco, M., Falcão, A., Sousa, J., Pais, A., Vitorino, C., *Strategies To Address Hard-To-Access Brain Tumors Using Solid Lipid Nanoparticles*, 8th Portuguese Young Chemists Meeting, 8PYCheM, Vila Real, Portugal, 17-19 May 2023. **Invited Lecture**
3. Vitorino, C., *Drug product development: Biopharmaceutical considerations*, Pharma Meeting: “Impacto das Propriedades Físicas das Partículas na Biodisponibilidade dos Medicamentos”, 17 de fevereiro de 2023, Coimbra iParque, **Invited Oral Presentation**
4. Vitorino, C., *Lipid nanoparticles for drug targeting to the brain delivery*, PhD and Postgraduate Advanced Course “Advanced drug delivery”, 20-24 de março de 2023, Faculdade de Farmácia da Universidade de Lisboa, **Invited Oral Presentation**
5. Vitorino, C., Nanolip: solid lipid nanoparticles for the treatment of brain tumors, Workshop ICNAS-RI-TE, 24 de março de 2023, Instituto de Ciências Nucleares Aplicadas à Saúde, Coimbra. **Invited Oral Presentation**.
6. Luis G. Arnaut. *Um prémio Nobel sela o fim de uma controvérsia ou sobrevive a perenidade da insatisfação intelectual? O caso das reações de transferência de eletrão*. XXXVI Jornadas de Engenharia Química, 13-17/03/2023, Instituto Superior Técnico (Lisboa). **Plenary Lecture**
7. Luis G. Arnaut. “*Case Studies of Medical Practices Emerging from Fundamental Science*”. 15º Encontro Nacional de Química-Física, 4-5/04/2023, online de Lisboa. **Plenary Lecture**
8. Luis G. Arnaut. “*Photodynamic Terapy in oncology and in infectious diseases*”. XXVII Encontro Luso-Galego de Química, 22-24/11/2023, Porto. **Plenary Lecture**
9. C. Serpa, S. Menezes. “*GreenAuto: Inovação Verde para a Indústria Automóvel*” Inovação@UC 2023, 5 December 2023, Coimbra, Portugal. **Invited Lecture**
10. C. Serpa, “*Passado, presente e futuro de uma empresa de base tecnológica*”, Descobre o teu futuro, Núcleo de Estudantes de Química/AAC, 8 February 2023, Coimbra, Portugal. **Invited Lecture**
11. Eusébio, M.E.S., *Estrutura de sólidos orgânicos: relevância na indústria*. Encontro Nacional de Estudantes de Química, Porto, 2023, **Plenary Lecture**
12. Eusébio, M.E.S., *Apontamentos de métodos de análise química em química e toxicologia forenses*, XVI Congresso Científico NEF/AAC, Coimbra, 2023. **Plenary Lecture**
13. Fausto, R., *Reactividade Química Induzida Vibracionalmente e por Efeito de Túnel*, Bluepharma, Coimbra, Novembro 2023. **Invited Lecture**
14. Pinho e Melo, T. M. V. D., Gonsalves, A., “*Conversão*” duma β -lactama, antibiótico clássico, num anti-viral: “*Mágica*” da Química!”, Sessão da Classe de Ciências, Academia das Ciências de Lisboa, Lisboa, 2023. **Invited Lecture**
15. Soares, M. I. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Generation of Molecular Diversity via Lewis Base-Catalyzed Reactions of Chromane Scaffolds and Allenoates*, Portuguese Young Chemists Meeting (PYCheM 2023), Vila Real, 2023. **Invited Lecture**

16. M. Pineiro, M., *Química Verde e Ambiente*, “ECONversas” Núcleo de Estudantes de Química (NEQ) e do Grupo Ecológico (GE) da Associação Académica de Coimbra, Coimbra, Portugal, 2023. **Invited Oral Presentation**
17. Pineiro, M., *Mechanochemistry, C-Scorpionates and Click Chemistry*, 1st IMS Workshop on Mechanochemistry, IST, Lisboa, 2023. **Invited Oral Presentation**
18. Geraldes, C.F.G.C., *Lanthanides as NMR structural and imaging probes - A reflection on 40 years development*, XXVIII Encontro da Sociedade Portuguesa de Química, 24-26 July 2023, Aveiro. **Plenary Lecture**
19. 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?* 3rd Meeting of Young Biophysicists – Biophysics Festival 2023, Porto. **Invited Oral Presentation**

National Oral Presentations (30)

1. Matias, P. M. C., Murtinho, D., Valente, A. J. M., Triazine porous organic polymers for dye adsorption. 15th National Physical Chemistry Meeting, 4-5 April, 2023. **Oral Presentation**
2. Basso, J., Fortuna, A., Vitorino, R. & Vitorino, C. Refining nanostructured lipid carrier design for enhanced pitavastatin delivery in glioblastoma, PharmahDay 2023 | Annual Meeting of PhD Students in Pharmaceutical Sciences, Coimbra, Portugal, 24th November, 2023. **Oral Presentation**
3. Chiarentin L., Vitorino, C., Addressing the AQbD for development and optimization of a rheology method. PharmahDay 2023 | Annual Meeting of PhD Students in Pharmaceutical Sciences, Coimbra, Portugal, 24th November, 2023. **Oral Presentation**
4. Domingues, C., Jarak, I., Veiga, F., Dourado, M., Vitorino, C., Figueiras, A., Tackling odds on oral cancer treatment employing mixed pluronic® PEI nanosystems. PharmahDay 2023 | Annual Meeting of PhD Students in Pharmaceutical Sciences, Coimbra, Portugal, 24th November, 2023. **Oral Presentation**
5. A. Duque-Prata, T.B. Pinto, P.J.S.B. Caridade, C. Serpa, “Using DFT to design new organic electron transfer systems: redox potentials and free energy calculations” 15º Encontro Nacional de Química-Física, 4-5/04/2023, online de Lisboa **Oral Presentation**
6. A. Duque-Prata, C. Serpa, P.J.S.B. Caridade, “Redox Potentials as a Tool for Designing Innovative Electron Transfer Systems: A Computational Approach” XXV Meeing of the Portuguese Electrochemical Society, 30/08-01/09/2023, Coimbra, Portugal. **Oral Presentation**
7. A. Duque-Prata, C. Serpa, P.J.S.B. Caridade, “CBR-DETS: Um Protocolo Holístico Para O Design De Sistemas De Transferência De Eletrão” IX Encontro Científico do NEQ/AAC, 14-16/11/2023, Coimbra, Portugal. **Oral Presentation**
8. M. Penetra, “Avaliação do mecanismo de internalização do fotossensibilizador LUZ51” IX Encontro Científico do NEQ/AAC, 14-16/11/2023, Coimbra, Portugal. **Oral Presentation**
9. M. Penetra, “Unraveling the mechanisms of cellular permeation of LUZ51”, 8th Portuguese Young Chemistry Meeting (8th PYCheM), 17 – 19/05/2023, Vila Real, Portugal. **Oral Presentation**
10. O.A. Chaves, A. Costa-Tuna, S. Pinto, J. Pina, C. Serpa, “Interaction Between Anionic Porphyrin and Human Serum albumin does not Inhibit the Photosensitizer Aggregation” Biophysics Festival, 1-2 June 2023, Porto, Portugal. **Oral Presentation**
11. A. P. Felgueiras, J. S. F. Cebola, K. T. de Oliveira, M. J. F. Calvete, M. M. Pereira, "meso-Aryl-1,3,5,7-tetramethyl BODIPY dyes revisited: A systematic approach for synthetic optimization", XXVIII Encontro Nacional da SPQ, 24-26 2023 July, Aveiro, Portugal. **Oral Presentation**

12. Z.A. Arnaut, A. P. Felgueiras, P. M. Stein, M. Rudolph, S. A. C. Carabineiro, R. M. B. Carrilho, A. Stephen K. Hashmi, M. M. Pereira, "Gold tris-binol menthol monophosphite for the preparation of phenol derivatives" 8th Portuguese Young Chemistry Meeting, 17-19 2023 May, Vila Real, Portugal. **Oral Presentation**
13. Z. A. Arnaut, C. Cruz-Oliveira, M. A. R. B. Castanho, M. M. Pereira, "Synthesis and evaluation of tetrapyrrolic macrocycles as potential antiviral", XXVIII Encontro Nacional da SPQ, 24-26 2023 July, Aveiro, Portugal. **Oral Presentation**
14. C.V. Domingos, F.M.S. Rodrigues, I. Tavares, R.T. Aroso, M.J.F. Calvete, M.M. Pereira, "Filmes de PVC fotodescontaminantes incorporando derivados de curcumina como fotossensibilizadores bioplástificantes", Encontro Nacional de Estudantes de Química, 31 March – 3 April 2023, Coimbra, Portugal **Oral Presentation**
15. R.T. Aroso, "Combinação sinérgica de inativação fotodinâmica com agentes antimicrobianos na inativação de *E. coli*: estudos *in vitro* e *in vivo* / Synergistic combination of photodynamic inactivation with antimicrobial agents in the inactivation of *E. coli*: *in vitro* and *in vivo* studies" Encontro Nacional de Estudantes de Química, 31 March – 3 April 2023, Coimbra, Portugal. **Oral Presentation**
16. M.M. Pereira, R.T. Aroso, S.M.A. Pinto, G. Piccirillo, "Química na melhoria da Saúde Pública: Contribuições do grupo de Química Medicinal da Universidade de Coimbra / Chemistry in the improvement of Public Health: Contributions of the Medicinal Chemistry group of the University of Coimbra", Escola Molecular at the Department of Chemistry of the University of Coimbra, Portugal (22/04/2023). **Oral Presentation**
17. M.M. Pereira, R.T. Aroso, S.M.A. Pinto, G. Piccirillo, "Química na melhoria da Saúde Pública: Estratégias para diminuição de microorganismos multirresistentes / Chemistry in the improvement of Public Health: Strategies for the reduction of multiresistant microorganisms" Junior Chemistry Olympics 2023 edition semi-final at the Department of Chemistry of the University of Coimbra, Portugal (18/03/2023). **Oral Presentation**
18. V. Masliy, F.M.S. Rodrigues, R.M.B. Carrilho, L. Kollár, M.M. Pereira, "Sustainable multi-step catalytic processes in continuous-flow", XXVIII Encontro Nacional da SPQ, 24-26 2023 July, Aveiro, Portugal. **Oral Presentation**
19. S.M.A. Pinto, D.S.S. Teixeira, S.C.C. Nunes, J.M. S. Almeida, Z. Garda, A. Pallier, A.A.C.C. Pais, C.M.A. Brett, É. Tóth, M.M. Pereira, C.F.G.C. Geraldes, "Fluorinated Mn(III)/(II)-Porphyrin with Redox-Responsive ¹H and ¹⁹F Relaxation Properties XXVIII Encontro Nacional da SPQ, 24-26 2023 July, Aveiro, Portugal. **Oral Presentation**
20. Baptista, J.A., Rosado, M.T.S., Castro, R.A.E., Canotilho, J., Fantechi, E., Chelazzi, L., Ciattini, S., Eusébio, M.E.S., Probucol solid forms obtained by crystallization from solutions - the same but more quite the same, 15ENQF, 15º Encontro Nacional de Química Física, online, 2023. **Oral Presentation**
21. Viegas, L.P. Understanding the chemistry behind the Kigali Amendment to the Montreal Protocol: an accurate computational protocol, XXVIII Encontro Nacional da SPQ, Aveiro, Portugal (2023). **Oral Presentation**
22. Viegas, L.P., Constantes de velocidade para reações de oxidação de compostos orgânicos na troposfera: a DFT salva o dia?, DFT@PT, Centre of Physics of the University of Coimbra, Coimbra, Portugal (2023). **Oral Presentation**
23. Viegas, L.P., Degradation of fluorinated compounds in the troposphere: an accurate computational protocol, 8th Portuguese Young Chemists Meeting, Vila Real, Portugal (2023). **Oral Presentation**
24. Prata-Duque, A., Serpa C., Caridade e P.J.S.B., Redox Potentials as a Tool for Designing Innovative Electron Transfer Systems: A Computational Approach", XXV Encontro Nacional de Electroquímica, Coimbra (2023). **Oral Presentation**

25. Carvalho, F.S., Caridade, P.J.S.B., Bigotte de Almeida, E., Vasconcelos, V., Detection of Traffic Signs and Segmentation of Brain Tumors in Magnetic Resonance Images - Computer Vision Applications, 29th Portuguese Conference on Pattern Recognition, Coimbra, Portugal, 2023. **Oral Presentation**
26. 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)- β -Carbolines and 3-(1H-Tetrazol-5-yl)- β -Carbolines: Synthesis and Evaluation as Anticancer Agents, Encontro da Sociedade Portuguesa de Farmacologia, Coimbra, Portugal, 2023. **Oral Presentation**
27. Carvalho, C., Loureiro, J. B., Barros, M., Ferreira, T., Quaresma, A., Oliveira, P.A., Pinho e Melo, T. M. V. D., Saraiva, L., Chemoprevention of Ultraviolet Radiation-induced Skin Damage Through Reactivation of Mutant p53, Encontro da Sociedade Portuguesa de Farmacologia, Coimbra, Portugal, 2023. **Oral Presentation**
28. Silva-Santos, E., Teixeira, F., Burke, A. J., Cordeiro, M. N. D. S., A Computational Study in the Hydrosilylation of Imines, Portuguese Young Chemists Meeting (PYCheM 2023), Vila Real, 2023. **Oral Presentation**
29. Coreta-Gomes F., Moreno M.J., Geraldes C.F.G.C., Nunes C., Coimbra M.A., Contribution of non-ionic interactions on bile salt binding by chitooligosaccharides: potential hypocholesterolemic activity, XXVIII Encontro da Sociedade Portuguesa de Química, 24-26 July 2023, Aveiro. **Oral Presentation**
30. Pinto, S.M.A. , Teixeira, D.S.S., Nunes, S.C.C., Almeida, J.M.S., Garda, Z., Pallier, A., Pais, A.A.C.C., Brett, C.M.A., Tóth, E., Pereira, M.M., Geraldes, C.F.G.C., Fluorinated Mn(III)/(II)-Porphyrin with Redox-Responsive ^1H and ^{19}F Relaxation Properties, XXVIII Encontro da Sociedade Portuguesa de Química, 24-26 July 2023, Aveiro. **Oral Presentation**

National Posters (66)

1. Sousa, J. F. M., Matias, P. M. C., Bernardino, E. F., Murtinho, D., Valente, A. J. M., Abreu, P. E., Marques, J. M. C., Reduced Chitosan for copper ions removal from aqueous solutions, 15th National Physical Chemistry Meeting, Lisboa, Portugal, online, 2023. **Poster – Award for best poster presentation**
2. Santos, J. R. C., Abreu, P. E., Marques, J. M. C., Investigation of curcumin and piperine aggregation in polar media by molecular dynamics simulations, 15th National Physical Chemistry Meeting, Lisboa, Portugal, online, 2023. **Poster**
3. Sousa, J. F. M., Matias, P. M. C., Bernardino, E. F., Murtinho, D., Valente, A. J. M., Abreu, P. E., Marques, J. M. C., Removal of copper ions from aqueous solution by using reduced chitosan, XXVIII Encontro Nacional da SPQ, Aveiro, Portugal, 2023. **Poster**
4. Santos, J. R. C., Abreu, P. E., Marques, J. M. C., Interaction of acetylcholine-binding protein from *Aplysia californica* with Imidacloprid: a computational investigation, XXVIII Encontro Nacional da SPQ, Aveiro, Portugal, 2023. **Poster**
5. Santos, C.I.A.V., Esteves, E., Diffusivities of caffeine in dense fluids- experimental data and theoretical correlations, 15th National Physical Chemistry Meeting, 2023 (online)
6. Santos, C. I. A. V., Development of sustainable processes using supercritical carbon dioxide- The importance of mass transport coefficients, Encontro Ciência 2023, Aveiro, Portugal, 2023. **Poster**
7. Trindade, A., Silva, D. S. A., Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., Nicolau, P. M. G., Fangaya, S. I. G., Caracterização da difusão mútua de complexos supramoleculares entre ciclodextrinas e íões cobalto, XXXII Reunião Anual de Medicina Dentária e Estomatologia, 2023. **Poster com Prémio**.
8. Carmo, C., Araújo, J., Botelho, M. F., Mafalda Laranjo, Cordova, A., Sobral, A. J. F. N. , BODIPY dyes for photodynamic therapy of cancer, 8th Portuguese Young Chemists Meeting, Vila Real, Portugal, May 17-19, 2023.

9. Araújo, J., 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 Biomedical Applications*, , 8th Portuguese Young Chemistry Meeting, Vila Real, May 17-19, 2023. **Poster**
10. Sofio, S. P. C., Ribeiro, A. C.F., Paiva, I., Valente, A. J. M., Caeiro, A., Esteso, M. A., *Monitoring of karst aquifer hydrochemistry by electrochemical parameters using multivariate statistical methods*, XXV Meeting of the Portuguese Electrochemical Society, 30 August- I September, Coimbra, Portugal, 2023. **Poster**
11. Tavares, N. C. T., Monteiro, D., Marques, U. F., Jesus, C. F., Alves, A. A. S., Filipe, H. A. L., Antunes, F. E., *Essential oils and their emulsions gathering antibacterial activity and molecular dynamics in unveiling new antiseptic cosmetics*, 8th PYChem, Portuguese Young Chemistry Meeting, Vila Real, May 2023 **Best Poster Award**
12. Sousa, F. J. P. M., Jesus, C. F., Góis, J. R., Pereira, N. A. M., Antunes, F., *Influence of reinforcing fiber's particle size in PBS-based composites*, 8th PYChem, Portuguese Young Chemistry Meeting, Vila Real, May 2023. **Poster**
13. Esteves, C. S. M. Antunes, F. E., *Biopolymers as shell materials for Microcapsules*, 8th PYChem, Portuguese Young Chemistry Meeting, Vila Real, May 2023. **Poster**
14. Esteves, M. I. M., Henriques, C. A., Antunes, F. E., *Synthesis of Amino Acid-Based Surfactants Through The Valorisation of Used Cooking Oils*, 8th PYChem, Portuguese Young Chemistry Meeting, Vila Real, May 2023. **Poster**
15. Jesus, C. F., Alves, A. A. S., Antunes, F.E., *Exploring the synergistic relationship between sugar-based cationic surfactants and commercially accessible eco-friendly surfactants*, XXVIII Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Julho 2023 . **Poster**
16. Cartaxo, D., Fonseca, F., Patrício, A., Nunes, S., Cova, T. F., Pais, A. A. C. C., *Molecular Descriptors for the Characterization of Antibiotics: Combining Machine Learning and Ab Initio Calculations*, 8th Portuguese Young Chemists Meeting, 8PYCheM, 17-19 May, Vila Real, Portugal, 2023. **Poster**
17. Cova, T. F., Nunes, S., Assis, S., Pais, A. A. C. C., *Characterizing Emerging Psychoactive Drugs by Mining Chemical Data and using Molecular Simulations*, 8th Portuguese Young Chemists Meeting, 8PYCheM, 17-19 May, Vila Real, Portugal, 2023. **Poster**
18. Nunes, S. C. C., Cova, T., Ferreira, A. L. C., Pais, A. A. C. C., *DNA Nanostructures as Antimicrobial Drug Nanocarriers: A Molecular Dynamics Study*, 8th Portuguese Young Chemists Meeting, 8PYCheM, 17-19 May, Vila Real, Portugal, 2023. **Poster**
19. Machado, T. F., Valente, A. J. M., Serra, M. E. S., Murtinho, D. *Porous organic polymers in electro- and photocatalysis*. XXV Meeting of the Portuguese Electrochemical Society. Coimbra, 30.08-01.09, 2023. **Poster**
20. Trindade, A. C. V., Silva, D. S. A., Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., Nicolau, P. M. G., Messias, A., Fangaia, S. I. G. *The behavior of chromium ions and the impact of new modified sodium hyaluronate on their removal*. XXV Meeting of the Portuguese Electrochemical Society. Coimbra, 30.08-01.09, 2023. **Poster**
21. Inácio, D. S., Valente, A. J. M., Cabral, A. M. T. D. P. V., Ribeiro, A. C. F. *Transport properties of sodium salts of sulfonamides: insights from molar ionic conductivities and diffusion coefficients*. XXV Meeting of the Portuguese Electrochemical Society. Coimbra, 30.08-01.09, 2023. **Poster**
22. Silva, D. S. A., Fangaia, S. I. G., Valente, A. J. M., Nicolau, P. M. G., Ribeiro, A. C. F., *Transport properties in multicomponent systems containing cyclodextrins and nickel ions*. XXV Meeting of the Portuguese Electrochemical Society. Coimbra, 30.08-01.09, 2023. **Poster**

22. Sousa, J. F. M., Murtinho, D., Vitorino, C., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M. How solvent and polymer concentration may improve the mechanical and conducting properties of SPEEK membranes. XXV Meeting of the Portuguese Electrochemical Society, Coimbra, 30.08-01.09, 2023. **Poster**
23. Trindade, A. C. V., Silva, D. S. A., Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., Nicolau, P. M. G., Fangaia, S. I. G. Caracterização da difusão mútua de complexos supramoleculares entre ciclodextrinas e iões cobalto. XXXII Reunião Anual de Medicina Dentária e Estomatologia de Coimbra, Coimbra, 24-25 março, 2023. **Poster**
24. Silva, E. C., Fajardo, A. R., Gomes, C., Pina, J., Valente, A. J. M. β -Cyclodextrin functionalized with carbon quantum dots as adsorbent sensors of metallic species in aqueous environments. 15th National Physical Chemistry Meeting, 4-5 April, 2023. **Poster**
25. Carmo, C., Almeida, J. M. S., Araújo, J., Brett, C. M. A., Sobral, A. J. F. N., Electrochemical studies of tris(perfluorophenoxy)benzaldehyde and tris(perfluorophenoxy)phenyl-BODIPY", , XXV Meeting of the Portuguese Electrochemical Society, Coimbra, Portugal, 30.08-01.09, 2023. **Poster**
26. Crespo, A., Rodrigo, M. M., Esteso, M. A., Cabral, A. M. T. D. P. V., Valente, A. J. M.: Ribeiro, A. C. F., Physicochemical properties characterization of sodium sulfadiazine in sodium dodecyl sulfate aqueous mixtures, XXV Meeting of the Portuguese Electrochemical Society, Coimbra, Portugal, 30.08-01.09, 2023. **Poster**
27. Rasteiro, P., Mendes, M., Vitorino, C., Hybrid nanoparticles as a multifunctional platform for brain tumor therapy, (P45), 4th SPLC-CRS Young Scientists Meeting, Delivering Science, Bridging Opportunities, Porto, 1 a 6 de fevereiro de 2023. **Poster**
28. Figueiredo, J., Mendes, M., Vitorino, C., Sousa, J.J., Enabling Technologies for Amorphous Solid Dispersions, (P18), 4th SPLC-CRS Young Scientists Meeting, Delivering Science, Bridging Opportunities, Porto, 1 a 6 de fevereiro de 2023. **Poster**
29. Basso, J., Pais, A., Fortuna, A., Vitorino, R. & Vitorino, C. Achieving accurate measurements without breaking the bank: A highly sensitive technique for pitavastatin quantification in human plasma. XXVIII Encontro nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Aveiro, Portugal, 24 – 26th July, 2023. **Poster**
30. Basso, J., Fortuna, A., Vitorino, R. & Vitorino, C. Decoding the molecular mechanisms of pitavastatin induced glioblastoma death through proteomics, ESN-ISN Neurochemistry School 2023, Faro, Portugal, 29th October – 4th November, 2023. **Poster**
31. ▼Domingues, C., Jarak, I., Veiga, F., Dourado, M., Vitorino, C., Figueiras, A. "Sprawling Oral Cancer treatment using mixed Pluronic®-based nanosystems". X Congresso Iberoamericano Ciências Farmacêuticas, Coimbra, 26-28th October 2023 ▼ **Prémio de melhor comunicação em painel.**
32. ▼Basso, J., Fortuna, A., Vitorino, R. & Vitorino, C. Unveiling the molecular mechanisms of pitavastatin induced glioblastoma death using proteomics, PharmahDay 2023 | Annual Meeting of PhD Students in Pharmaceutical Sciences, Coimbra, Portugal, 24th November, 2023, ▼ **Prémio de melhor comunicação em painel.**
33. A. C. S. Gonzalez, R. T. Aroso, R. M. B. Carrilho, M. M. Pereira, “Development of Sustainable Catalytic Processes towards Photosensitive Polymeric Materials”, XXVIII Encontro Nacional da SPQ, 24-26 2023 July, Aveiro, Portugal. **Poster**
34. R.M. B. Carrilho, A.C.S. Gonzalez, “Polycarbonates as bioplastics” in Mostra Tecnológica of the Event 2º Relatório de Progresso do Pacto Português para os Plásticos, February 2023, University of Coimbra, Coimbra. **Poster**
35. Bounif, H., Justino, L.L.G., Soares, M.I.L., Costa, T., Pinho e Melo, T.M.V.D., Zouari, N., Fausto, R., Stable Al(III) Complexes with a Water Soluble Schiff Base Synthesized in Non-aqueous Media: Overcoming

Hydrolysis for Improved Water Stability, XXVIII Encontro Nacional da SPQ, Aveiro, Portugal, Julho 2023.
Poster

36. Sequeira, M.C.M., Nogueira, B.A., Caetano, F.J.P., Diogo, H.P., Fareleira, J.M.N.A., Fausto, R., *Adipates as New Phase Change Material: Seeking for a Low Temperature Energy Storage System*, 15º Encontro Nacional de Química Física da SPQ – online, Abril 2023. **Poster**
37. Braz, S., Justino, L.L.G., Ramos, M.L., Pina, J., Fausto, R., *W(VI) Alizarin Red S Complexes: Interaction with Cationic Surfactants in view of Potential for Applications in Sensing*, 15º Encontro Nacional de Química Física da SPQ – online, Abril 2023. **Poster**
38. Fateixa, S., Nogueira, H.I.S., Paixão, J.A., Fausto, R., Trindade, T., *Vibrational Imaging Applied to Carbamazepine in Pharmaceutic Formulations*, 15º Encontro Nacional de Química Física da SPQ – online, Abril 2023. **Poster**
39. Silva, J.F.C., Pereira Silva, P.S., Ramos Silva, M., Fantechi, E., Chelazzi, L., Ciattini, S., Eusébio, M.E.S., Rosado, M.T.S., *Stability enhancement of ranolazine co-amorphosus systems*, XXVIII Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Aveiro, Portugal, 2023. **Poster**
40. Serrão, G.D., Silva, J.F.C., Pereira Silva, P.S., Ramos Silva, M., Eusébio, M.E.S., Rosado, M.T.S., *Bromine/Iodine bond synthons for co-crystallization*, XXVIII Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Aveiro, Portugal, 2023. **Poster**
41. Santos, J.A.V., Peluso, F., Gamberini, M.C., Baptista, J.A., Maria, T.M.R., Canotilho, J., Castro, R.A.E., Eusébio, M.E.S., *Novel Supramolecular Pitavastatin Calcium Forms: Insights and Characterization*, I5ENQF, 15º Encontro Nacional de Química Física, online, 2023. **Poster**
42. Silva, D.H.F., Marques, A.M.A., Baptista, J.A., Canotilho, J., Eusébio, M.E.S., Castro, R.A.E., *Ternary Diagrams – A crucial step for co-crystal/salt scale-up*, 15º Encontro Nacional de Química Física, online, 2023. **Poster**
43. Silva, J.P.F., Baptista, J.A., Castro, R.A.E., Maria, T.M.R., Eusébio, M.E.S., Canotilho, J., *Roxadustat: novel multicomponent solid systems*, 15º Encontro Nacional de Química Física, online, 2023. **Poster**
44. Almeida, A.C., Ferreira, P.O., Baptista, J.A., Castro, R.A.E., Caires,F.J., Eusébio, M.E.S., *Design and screening of nimesulide cocrystals*, 15º Encontro Nacional de Química Física, online, 2023. **Poster**
45. Silva, M.I.G., Canotilho, J., Eusébio, M.E.S., Castro R.A.E., Maria, T.M.R., *Investigation on new solid forms of baricitinib: co-crystals and polymorphs*, XXVII Encontro Luso-Galego de Química, Porto, Portugal, 2023. **Poster**
46. Pardal, I.C.R., Baptista, J.A., Canotilho, J., Eusébio, M.E. S., Maria, T.M.R. Castro, R.A.E., *Solid forms of diflunisal: new co-crystals*, XXVII Encontro Luso-Galego de Química, Porto, Portugal, 2023. **Poster**
47. Santos, A., Monsanto, P., Franco, J., Eusébio, M.E.S, Margalho, C., *Determinação de drogas de abuso em fluido oral por precipitação proteica e GC-MS-EI*, 21º Encontro de Medicina Legal e Ciências Forenses, Lamego, Portugal, 2023. **Poster**
48. Pereira, A. M. R., Carvalho, C., Soares, M. I. L., Saraiva, L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Exploring the Pyrrolo[1,2-c]thiazole Scaffold: Design of Novel p53-activating Agents for Colorectal Cancer Therapy*, Portuguese Young Chemists Meeting (PYCheM 2023), 17-19 Maio, Vila Real, Portugal, 2023. **Poster**
49. Pereira, A. B., Carvalho, C., Soares, M. I. L., Saraiva, L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *New Chiral 6,7-Bis(hydroxymethyl)-1H,3H-pyrrolo[1,2-c]thiazoles as p-53 Activating Agents for Colorectal Cancer Targeted*

Therapy, Portuguese Young Chemists Meeting (PYCheM 2023), 17-19 de maio, Vila Real, Portugal, 2023.
Poster

50. Gonçalves, J. V. R., Alves, A. J. S., Bártolo, I., Taveira, N., Pinho e Melo, T. M. V. D., Novel Spiro-penicillanates from 6-Alkylidene penicillanates via Formal Cycloaddition of Allenoates and Dimethylsulfonium Ylides, Portuguese Young Chemists Meeting (PYCheM 2023), 17-19 de maio, Vila Real, Portugal, 2023. **Poster**

51. Carvalho, J., Carvalho, C., Loureiro, J., Barros, M., Soares, M. I. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., Saraiva, L., Reactivation of Mutant p53 to Prevent Ultraviolet Radiation-induced Skin Damage, Encontro de Investigação Jovem, 10-12 de maio 2023, Porto, Portugal, 2023. **Poster**

52. Bartolomeu, A., Alves, A. J. S., Correia-Barros, G., Lopes, S. M. M., Laranjo, M., Pineiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., Advances in Platinum(II)-based Chlorins: Scale-up, Chemical Modulation and Photodynamic Activity, XVIII National Meeting of the Portuguese Society of Chemistry, Aveiro, Portugal, 24-26 de julho, Portugal, 2023. **Poster**

53. Duarte, B., Sousa, J., Casaleiro, R., Moura, M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Cardoso, A. L., Piñeiro, M., Mechanochemical Transformations of Furans: Sustainable Methodologies for the Synthesis of Heterocycles, XVIII National Meeting of the Portuguese Society of Chemistry, Aveiro, Portugal, 24-26 de julho, Portugal, 2023. **Poster**

54. Simões, J. C. S., Veiga, D., Duarte, S. F., Lopes, S. M. M., Rodrigues, A. C. B., Seixas de Melo, S. J., Pineiro, M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Oxime Functionalization Towards the Enhancement of Photophysical Properties of BODIPYs, XVIII National Meeting of the Portuguese Society of Chemistry, Aveiro, Portugal, 24-26 de julho, Portugal, 2023. **Poster**

55. Bouznif, H., Justino, L. L. G., Soares, M. I. L., Costa, T., Ramos, M. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., Zouari, N., Fausto, R., Stable Al(III) Complexes of a Water-Soluble Schiff Base: Overcoming Hydrolysis for Improved Water Stability, XVIII National Meeting of the Portuguese Society of Chemistry, Aveiro, Portugal, 24-26 de julho, Portugal, 2023. **Poster**

56. Matias, P. M. C., Sousa, J. F. M., Bernardino, E., Abreu, P., Marques, J., Murtinho, D., Valente, A. J. M., Reduced Chitosan as an Adsorbent for Metal Ion Removal from Water, 8th Portuguese Young Chemists Meeting, 17-19 maio, Vila Real, Portugal, 2023. **Poster**

57. A. Itacarambi, R.D.M. Travasso, A. Salvador, Modelling the transport of hydrogen peroxide in human tissues. 3rd Meeting of Young Biophysicists – Biophysics Festival 2023, Porto. **Poster**

58. C.V. Ramos, M.M. Cordeiro, J. Samelo, M.J. Moreno, Biophysical characterization of methyl- β -cyclodextrin-membrane interaction for application in drug and gene delivery, XXVIII Encontro da Sociedade Portuguesa de Química, 24-26 July 2023, Aveiro. **Poster**

59. Fernanda Machado, Irene Gómez, Alba Tamargo, Carolina Cueva, Raquel de Diego, María Dolores del Castillo, Manuel A. Coimbra, Filipe Coreta-Gomes, Coffee soluble fibers: role in heart and gut health, Ciência 23, 5 – 7 de Julho, 2023, Universidade de Aveiro. **Poster**

60. Fernanda Machado, Irene Gómez, Alba Tamargo, Carolina Cueva, Raquel de Diego, María Dolores del Castillo, Manuel A. Coimbra, Filipe Coreta-Gomes, Coffee soluble fibers: effects on in vitro cholesterol bioaccessibility and colonic fermentability, Dare2Change, Innovation-Driven Agrifood Business, 21 de Março, 2023, Porto. **Poster**

61. Fernanda Machado, Irene Gómez, Raul Hurtado Ribeira, Diana Martin Garcia, Manuel A. Coimbra, Maria Dolores del Castillo, Filipe Coreta-Gomes, Study of coffee soluble fibers cholesterol-lowering properties, XXVIII Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, 24 - 26 julho 2023,Aveiro. **Poster**

62. Helena Laronha, Filipe Coreta-Gomes, Manuel A. Coimbra, Elisabete Coelho, Portuguese Northeast Mushroom (*Lactarius deliciosus*) Hypocholesterolemic Potential, Ciéncia 23, 5–7 Julho 2023, Universidade de Aveiro. **Poster**

63. Helena Laronha, Maria Inês Arranca, Bárbara Oliveira, Filipe Coreta-Gomes, Manuel A. Coimbra, Elisabete Coelho, Mushroom as potential hypocholesterolemic functional ingredients, Dare2Change, Innovation-Driven Agrifood Business, 21 de Março, 2023, Porto. **Poster**

64. Helena Laronha, Maria Inês Arranca, João Teixeira, Filipe Coreta-Gomes, Manuel A. Coimbra, Elisabete Coelho, Wild endogenous mushroom: chemical characterization to hypocholesterolemic properties, XXVIII Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, 24 - 26 julho 2023, Aveiro. **Poster**

65. M.M. Cordeiro, M.J. Moreno, G. Jung, Synthesis and Characterisation of New Membrane Impermeable pH Sensitive Probes, Biophysics Festival 2023, 1-2 June 2023, Porto. **Poster**

66. Vítor Paiva, Carlos Coelho, João Jesus, Ana M. Gândara, Zaida L. Almeida, Ricardo Lagoa, Daniela C. Vaz, Maria J. Moreno, In vitro enzymatic degradability of PEG-BSA biofilms, X Congresso Nacional de Biomecânica. 5-6 maio, Figueira da Foz, Portugal, 2023. **Poster**

Conferences / Seminars Organization (33)

1. Marques, J. M. C., 15th National Physical Chemistry Meeting/4th Computational Chemistry Symposium, Lisboa, Portugal, 4-5 I April, 2023. **Organizing Committee**
2. Marques, J. M. C., XXV Meeting of the Portuguese Electrochemical Society, Coimbra, Portugal, 30 August - I September, 2023. **Local Organizing Committee**
3. Abreu, P.E. – SPE2023 XXV Meeting of the Portuguese Electrochemical Society, Coimbra, Portugal 30 August – I September 2023 **Local Organizing Committee**
4. Ribeiro, A. C. F. – SPE2023 XXV Meeting of the Portuguese Electrochemical Society, Coimbra, Portugal 30 August – I September 2023 **Local Organizing Committee**
5. Fangaia, S. I. G. – SPE2023 XXV Meeting of the Portuguese Electrochemical Society, Coimbra, Portugal 30 August – I September 2023 **Local Organizing Committee**
6. Cunha, C., Rodrigues, A. C. B. - XXV Meeting of the Portuguese Eletrochemical Society Coimbra, Portugal 30 August – I September 2023 **Local Organizing Committee**
7. Nunes, S. C. C., 8th Portuguese Young Chemists Meeting, UTAD, Vila Real, Portugal, 2023, Maio 2023. **Scientific Committee**
8. Valente, A. J. M. XXV Meeting of the Portuguese Electrochemical Society, Coimbra, Portugal 30 August – I September 2023 **President of the Local Organizing Committee**
9. Valente, A. J. M. XI Congreso de jóvenes investigadores en polímeros - JIP 2023, Alicante, 02.10 – 05.10.2023. **Scientific Committee**
10. Seminar: The challenge of oral delivery of small interfering RNA vectors, Cristine Charrueau, Unité pédagogique des Sciences Pharmacotechniques , Unité de Technologies chimiques et biologiques pour la santé, Faculté de Pharmacie – Université Paris Cité, 27 de Abril de 2023, FFUC. **Organizing Committee**
11. Webinar: "Insights in Regulatory Science", Rui Santos Ivo, Presidente do Infarmed, 17 de julho, integrado no Curso Avançado “Regulatory Affairs & Patents” (on-line). **Organizing Committee**
12. L. G. Arnaut, **Foresight Workshop** on Opportunities with laser-based Technologies, LaserLab Europe, Riga, 24-25/07/2023
13. Costa, E., *Animal Experimentation*. XII In4Med, Coimbra, 2023. **Workshop Coordinator**
14. Costa, E., 6^a Edição do Curso Pós-Graduado de Actualização de Ciências em Animais de Laboratório Categoria B, Faculdade de Farmácia da Universidade de Lisboa, Lisboa, 2023. **Module Trainer**
15. Fausto, R., XXXV European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS 2023), Jyvaskyla, Finlândia 14-17 Agosto 2023. **President of the International Scientific Committee**.
16. Fausto, R., XV Encontro de Química-Física da Sociedade Portuguesa de Química, Lisboa, Portugal, 4-5 Abril 2023 – online – **Scientific Committee**
17. Fausto, R., XVII Iberian Joint Conference on Atomic and Molecular Physics (IBER 2023), Coimbra, Portugal, 5-8 Setembro 2023. **Scientific and Organizing Committees**
18. Fausto, R., XVIII Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Aveiro, Portugal, 24-26 Julho 2023. **Scientific Committee**

19. Fausto, R., European Meeting on Physical Organic Chemistry: Towards Understanding the Nature of Noncovalent Interactions (EMPOC 2023), Breslávia, Polónia, 5-9 Junho 2023. **Scientific Committee**
20. Fausto, R., 1st Meeting of the External Evaluation Committee of ReMade@Arie, Coimbra, Portugal, 12-13 Junho. **President of the Organizing Committee**.
21. Eusébio, M.E.S., YoungMultis 2023, Multiscale Phenomena in Condensed Matter, Kraków, Poland, online, 2023. **Scientific Committee**
22. Eusébio, M.E.S., I5ENQF, 15º Encontro Nacional de Química Física, Portugal, online, 2023. **Organizing Committee**
23. Eusébio, M.E.S., MEDICTA 2023, 16th Mediterranean Conference on Calorimetry and Thermal Analysis, Porto, Portugal, 2023. **Organizing Committee**
24. Eusébio, M.E.S., JEEP 2023, Journées d'Etude des Equilibres entre Phases, Rouen, France, 2023. **Scientific Committee**
25. Burke, A. J., International Symposium on Synthesis and Catalysis, University of Evora, Évora, Portugal, 5–8 September 2023. **Chairperson**
26. Pineiro, M., IX Encontro Científico do Núcleo de Estudantes de Química da Associação Académica de Coimbra (NEQ/AAC), Coimbra, Portugal, novembro, 2023. **Organizing Committee**
27. Coreta-Gomes, F., 3rd Meeting of Young Biophysicists, Biophysics Festival 2023, 1-2 June 2023, Porto, Portugal **Scientific Committee**
28. Moreno, M.J., BOOSTBIOP, University of Chemistry and Technology, Prague, Czechia, 14-15 June 2023 **Scientific Committee**) – online
29. Moreno, M.J., 3rd Meeting of Young Biophysicists, Biophysics Festival 2023, 1-2 June 2023, Porto, Portugal **Scientific Committee**
30. Salvador, A., 2023 Summer School on Computational Biology, 4-14 September 2023, Coimbra, Portugal **Coordinator**
31. Vaz, D.C., 10.º Congresso Nacional de Biomecânica, Figueira da Foz, Portugal, 5-6 May 2023 **Scientific Committee**
32. Gaspar, J., XI Congresso Nacional de Comunicação de Ciência SciComPT 2023, Bragança, Portugal, 3-5 May 2023 **Scientific Committee**
33. Gaspar, J., - XXV Meeting of the Portuguese Electrochemical Society Coimbra, Portugal 30 August – 1 September 2023 **Local Organizing Committee**

Other Events (4)

1. “Metal complexes in MRI: from lanthanides to transition metals”, Eva Jakab Tóth, Centre de Biophysique Moléculaire, CNRS, Orleans, Chemistry Department, University of Coimbra, Maio, 2023.
2. S.M.A. Pinto, M.M. Pereira, R.M.B. Carrilho, M.J.F. Calvete, Semifinal das Olimpíadas da Química Júnior-SPQ, Chemistry Department, University of Coimbra, 2023.
3. Dia Aberto Projeto “Educaplast - A problemática da poluição por microplásticos e o desenvolvimento de bioplásticos como alternativa de futuro: comunicar e envolver a Sociedade” - 29 de novembro 2023, Departamento de Química FCTUC (120 alunos)
4. Diogo A. Pereira, Amilcar Duque-Prata - 5ª Edição Escola Molecular – Fevereiro – Maio 2022, Universidade de Coimbra.

Thesis (113)

PhD Thesis (16)

1. Luís Otávio Miranda Peixoto, *Modelagem da qualidade da água de rios urbanos através de parâmetros socioeconómicos com recurso a Redes Neuronais*, Tese de Doutoramento, UTFPR - Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Jan.-Julho 2023.
[Orientação: Julio Cesar Rodrigues Azevedo, J. Costa Pereira]
2. Juliana Gonçalves Araújo, *Advanced Biomaterials Based in Metal Organic Frameworks (MOFs) for Photodiagnostic, Drug Delivery and Magnetic Hyperthermia Therapy*, Doutoramento em Química de Materiais do Programa Doutoral da FCT ChemMat, (Ref. Ref. 20-2019), , Universidade de Coimbra. Co-orientador:, Departamento de Engenharia e Ciencias Nucleares, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa
[Orientação: Abílio José Fraga do Nascimento Sobral, Co-orientador: Laura C. J. Pereira Waerenborgh]
3. Elodie Melro, *Development of efficient selective separation methods for Agroforestral biomass fractionation: From intermolecular interactions to new lignin-based Materials of Added Value*, Departamento de Química, Universidade de Coimbra.
[Orientação: Filipe Antunes, Co-orientador: Artur Valente]
4. Mohit Sharma, *Bio-based coatings for improving paper printing and barrier properties*, Departamento de Engenharia Química, Universidade de Coimbra. [Orientador: Paulo Ferreira; Co-orientador: Artur J.M. Valente]
5. Maria Inês Pimentel Mendes. “*Molecular contrast agents for photoacoustic tomography*”. PhD Thesis, Universidade de Coimbra, April 2023.
[Orientação: L. G. Arnaut, M. Calvete]
6. Elisa Cristina Marçalo Brás. *Jet-Cooled and Matrix-Isolated Radicals: Monitoring Interactions and Reactions through IR Spectroscopy*, Doutoramento em Química, Departamento de Química, FCTUC, 2023.
[Orientação: Fausto, R.; Suhm, M.; Cristiano, M.L.S.]
7. Giusi Piccirillo. *Desenvolvimento de materiais sólidos para remediação ambiental*, Doutoramento em Química, Universidade de Coimbra, 2023.
[Orientação: Calvete, M.; Eusébio, M.E.S.; Tomé, J.P.C.]
8. Paulo Vilarim, *Etnoconhecimento dos Terena: Da Prática Cultural à Educação Científica*, PhD História da Ciência e Educação Científica, University of Coimbra, 2023
[Orientação: Co-supervisor: S.P.J. Rodrigues]
9. Roberto Lamanna, *Ressonância Magnética em Portugal: Origem e Desenvolvimento*, 2023 PhD História da Ciência e Educação Científica, University of Coimbra, 2023
[Orientação: Co-supervisor: S.P.J. Rodrigues]
10. Américo José dos Santos Alves "Novel Spiro-Lactams as New antimicrobial Agents", Américo José dos Santos Alves, Tese de Doutoramento em Química (ramo de Síntese Orgânica), Universidade de Coimbra, janeiro de 2023 (Bolsa de Doutoramento FCT PD/BD/128910/2017 e COVID/BD/152144/2022).
[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D., Taveira, N., Prudêncio, M.]
11. Isabel Gomes da Mata “*Development of a Tumour-targeted Strategy for Photodynamic Therapy*”, Tese de Doutoramento em Química (ramo de Química Médica), Universidade de Coimbra, 2023 (Bolsa de Doutoramento FCT PD/BD/135289/2017, programa doutoral MedChemTrain).
[Orientação: Brito, R., Pinho e Melo, T. M. V. D.; Gomes-da-Silva, L. C.]

CQC – Overall Output Indicators 2023

12. Carla Sofia da Palma Grosso “*Synthesis of Novel Indoles and Bis(Indolyl)Methanes: Approaches to Structures with Biological Activity*”, Tese de Doutoramento em Química (ramo de Síntese Orgânica), Universidade de Coimbra, julho de 2023 (Bolsa de Doutoramento FCT SFRH/BD/130198/2017 e COVID/BD/151903/2021).

[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D., Lemos, A.]

13. Márcia Alexandra dos Reis Ribeiro Rénio, “*Development of New Thiourea Organocatalysts for Asymmetric Reactions*”, Tese de Doutoramento em Química, ITQB – Universidade Nova de Lisboa, 2023. (Programa Doutoral CATSUS).

[Orientação: Ventura, R., Murtinho, D.]

14. Carla Sofia Loureiro Gomes, “*Green Approaches for the Synthesis of N-heterocyclic Ligands: Synthesis of Organometallic Complexes and Catalytic Evaluation*,” Tese de Doutoramento em Química, Universidade de Coimbra, fevereiro de 2023 (Bolsa de Doutoramento FCT PD/BD/135531/2018, Programa Doutoral CATSUS).

[Orientação: Royo, B., Martins, M.L., Pineiro, M.]

15. Carlos Manuel Pereira Bornes “*Estudo RMN de centros ácidos em zeólitos via moléculas sonda*”, Tese de Doutoramento, Universidade de Aveiro, 2023.

[Orientação: L. Mafra, J. Rocha, C.F.G.C. Geraldes]

16. Nícia Filipa Rosário Ferreira, “*Interações Proteína-Proteína e Proteína-RNA na Proteína Não-Estrutural I (NS1) do Vírus Influenza*”, Tese de Doutoramento em Química, Universidade de Coimbra, 2023.

[Orientação: R.M.M. Brito, I. Moreira]

MSc Thesis (45)

1. Sara Pinheiro de Carvalho Sofio, *Estudo da hidrodinâmica em aquíferos cársicos a partir da análise hidroquímica nas nascentes*, Mestrado Química (área de especialização, Controle da Qualidade e Ambiente, Universidade de Coimbra, 2023.
[Orientação: A.C.F. Ribeiro, Co-orientação: I.M.R. Paiva].
2. Daniel S. Inácio, *Estruturas supramoleculares envolvendo antibióticos: uma contribuição para o mapeamento de soluções para a remoção de antibióticos dos efluentes*, Área de especialização em Controlo de Qualidade e Ambiente, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade de Coimbra, 2023. [Orientação: A.C.F., Ribeiro; Co-orientadora: A.M.T.D.P.V. Cabral]
3. Daniela Sofia Azevedo da Silva, *Propriedades de transporte em sistemas multicomponentes contendo compostos farmacêuticos e iões provenientes de ligações metálicas biomédicas*, Área de especialização em Controlo de Qualidade e Ambiente, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade de Coimbra, 2023.
[Orientação: A.C.F. Ribeiro; Co-orientadora: S.I.G. Fangala].
4. Ana Alexandra Ferreira de Oliveira Martins, *An LC-MS untargeted metabolomics screening in CSF samples from patients with Mild Cognitive Impairment*, Universidade de Coimbra, 2023.
[Orientação: J. Costa Pereira, Bruno Manadas].
5. Leonardo K. Santos, *Estudos de BODIPYs dimericos para estudos de foto diagnostico e fototerapia*, Tese de Mestrado em Química, Departamento de Química, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade de Coimbra, 2023.
[Orientação: Abílio José Fraga do Nascimento Sobral].
6. Guilherme José Alves, *Estudos de BODIPYs como antivirais do SARS-CoV-*, Tese de Mestrado em Engenharia Biomédica, Departamento de Física da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra em colaboração com o CNC, da Faculdade de Medicina da Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: Abílio José Fraga do Nascimento Sobral].
7. Sara Nascimento, *Estudos de produção de biomateriais para implantes ósseos*, Tese de Mestrado em Engenharia Biomédica, Departamento de Física da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra 2023/2024. (Em curso).
[Orientação: Abílio José Fraga do Nascimento Sobral].
8. Paulo Barradas. *The chemistry and photochemistry of chitosan randomly labeled polymers and cationic Ladder-type polymers containing pyrene as a fluorescence probe*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2023.
[Orientação: J. S. Seixas de Melo].
9. Carla Gomes. *Caracterização de diferentes uísques com base em técnicas fluorescentes resolvidas temporalmente e HPLC-DAD*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2023.
[Orientação: J. S. Seixas de Melo; Co-Orientação: Telma Costa].
10. Tomás Duarte (2022-2023): *Valorização da flora das Terras de Sicó: extração, caracterização e potencial aplicação em produtos cosméticos e embalagens biodegradáveis*.
[Orientação: Filipe Antunes; Co-Orientação: Andreia Alves].
11. Eva Faustino Bernardino, *Síntese de derivados de quitosano para remoção de metais pesados de soluções aquosas*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2023. [Orientação: Artur J.M. Valente; Co-Orientação: Dina Murtinho]
12. Joana Figueiredo, *Bioenabling technologies for obtaining amorphous solid dispersions*, Mestrado em Tecnologias do Medicamento, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2023 [Orientação: João José Sousa; Co-Orientação: Carla Vitorino]

13. Patrícia Rasteiro, *Hybrid nanoparticles as a multifunctional platform for brain tumor therapy*, Mestrado em Tecnologias do Medicamento, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2023 [Orientação: Carla Vitorino; Co-Orientação: Maria Mendes]
14. Guilherme André Mendes Pita, *TAU PET imaging biomarkers for alzheimer's disease: Regulatory aspects*, Mestrado em Tecnologias do Medicamento, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2023 [Orientação: Antero Abrunhosa; Co-Orientação: Carla Vitorino]
15. Beatriz da Silva Moreira, *Electronic Device Assisted Formulation Design: Regulatory Insights on Progress and Prospects*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2023 [Orientação: Carla Vitorino]
16. Diogo Lourenço, *Complex topical generic Drugs: a comprehensive regulatory analysis*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2023 [Orientação: Carla Vitorino]
17. Joana Raquel Carvalho da Silva, *Nanocatalytic Medicine: Concept, Trends, and Future Horizons*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2023 [Orientação: Carla Vitorino]
18. Evgeni Seletchi. “Gene Therapy with Photoacoustic Waves”. Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023.
[Orientação: L. G. Arnaut]
19. Joana Inês Costa Santos. “Influence of Light Wavelength on Cellular Viability After Photodynamic Therapy” Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023.
[Orientação: F. A. Schaberle and L. C. Gomes-da-Silva]
20. Mafalda Penetra. “Photodynamic Therapy Using A Novel Carboxamide Halogenated Bacteriochlorin of Low Molecular Weight”. Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023.
[Orientação: L. C. Gomes-da-Silva]
21. Tânia Sousa, “Photophysical Processes of Tetrazolones: A Theoretical Approach Based on DFT and TD-DFT”, Mestrado em Biologia Computacional, Universidade de Coimbra, 2023.
[Orientação: Pedro Caridade; Co-orientação. Carlos Serpa]
22. Carolina Domingos, “Materiais Fotossensíveis para fotoinativação de microrganismos” Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2023. [Orientação: Maria Miguéns Pereira, Co-orientação: Rafael Tiago Pereira Martins Aroso].
23. Yaroslav Hryhoryev, “Síntese e caracterização de porfirinas de paládio para a construção de sistemas TTA-UC em matrizes sólidas”, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2023. [Orientação: Sara M.A. Pinto, Co-orientação: João Pina].
24. Inês Gonçalves, “Functionalized Carbon Materials for Carbon Dioxide Capture and Catalytic Processes for its Valorization”, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2023. [Orientação: Rui Carrilho, Co-orientação: Fábio Gil].
25. Maria Beatriz Ana Carvalho. Síntese, Caracterização Conformational e Vibracional, e Estudo da Fotoquímica de Azido-Naftóis Isolados em Matrizes Criogénicas, Mestrado em Química (Química Avançada e Industrial), Departamento de Química, FCTUC, 2023.
[Orientação: Nunes, C.M., Lopes, A.L.C.]
26. Sofia Silva Sousa Bráz, *Estudos Estruturais, Físico-Químicos e de Complexação com Metais Divalentes de Compostos da Família do Índigo*, Mestrado em Química (Química Avançada e Industrial), Departamento de Química, FCTUC, 2023.
[Orientação: Fausto, R.; Justino, L.L.G.]
27. Guilherme Duarte Serrão, *Novel Halogen-Bonded Co-crystals*, Mestrado Química, Departamento de Química, Universidade de Coimbra, 2023.

[Orientação: Rosado, M.T.S.; Crispini, A.]

28. Duarte Henrique Ferreira da Silva, *Cocristais/sais: viabilidade da transposição de escala e compatibilidade com excipientes*, Mestrado em Tecnologias do Medicamento, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2023.

[Orientação: Castro, R.A.E.]

29. João Paulo Ferreira da Silva, *Preformulation studies on roxadustat*, Mestrado em Tecnologias do Medicamento, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2023.

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

30. Mafalda Cabrita Antunes, *Os efeitos de natureza química da aplicação dos descontaminantes NRBQ nos vestígios de identificação humana (lofoscópicos e biológicos)*, Mestrado em Química Forense, Departamento de Química, Universidade de Coimbra, 2023.

[Orientação: Viegas, F.; Eusébio, M.E.S.]

31. Adriana Brito dos Santos, *Contributo para o estudo da estabilidade de drogas de abuso em amostras biológicas analisadas por cromatografia de gás acoplada à espectrometria de massa*, Mestrado em Química Forense, Departamento de Química, Universidade de Coimbra, 2023.

[Orientação: Margalho, C.; Eusébio, M.E.S.]

32. Francisco Marques Afonso de Matos, *Desenvolvimento e validação de um método multi-substância para análise de rotina de Pesticidas em amostras post-mortem, por aplicação da técnica de UPLC-MSMS*, Mestrado em Química Forense, Departamento de Química, Universidade de Coimbra, 2023.

[Orientação: Fonseca, S.; Maria, T.M.R.]

33. Tânia P. A. Sousa, *Time-dependent density functional theory applied to photochemical processes*, MSc in Computational Biochemistry, Universidade de Coimbra, 2023.

[Supervisor: P.J.S.B. Caridadade].

34. João Victor Rocha Gonçalves, *Novas estratégias para a síntese de espiro-β-lactamas quirais*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2023.

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

35. Maria João Vieira Coelho, *Validação de um método analítico para a determinação de antidepressivos em amostras de sangue por LC-MS/MS*, Mestrado em Química Forense, Universidade de Coimbra, 2023.

[Orientação: Proença e Cunha, P., Pinho e Melo, T. M. V. D.].

36. Adelino M. R. Pereira, *1H,3H-Pirrolo[1,2-c]tiazóis quirais no tratamento do cancro colorretal: síntese de novos derivados do composto líder MANIO*, Adelino M. R. Pereira, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023.

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

37. Ana Beatriz Salgado Pereira, *Síntese de novos derivados 1H,3H-pirrolo[1,2-c]tiazóis quirais como ativadores da proteína P53 para o tratamento do cancro colorretal*, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023.

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

38. João André Dias Silvestre, *Síntese de espiro-β-lactamas com potente atividade antimicrobiana: estudo de condições de reação em fluxo contínuo*, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023.

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

39. José Maria Canelas Gomes Teixeira, *Click chemistry derived 1,2,3-Triazole hybrids in lung cancer therapy*, Mestrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade de Coimbra, 2023.

[Orientação: Burke, A. J.]

40. Mariana Marques Costa, *Mecanoquímica: alternativa sustentável para reações multicomponente catalisadas por zinco*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2023.

[Orientação: Pineiro, M.]

CQC – Overall Output Indicators 2023

41. Bruna Duarte, *Transformações mecanoquímicas de bis-furanos: metodologias sustentáveis para a síntese de compostos de elevado valor acrescentado a partir de biomassa*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2023.
[Orientação: Cardoso, A. L., Pineiro, M.]
42. Soraia Filipa Rodrigo Ferreira, *Transformações mecanoquímicas de bis-furanos: metodologias sustentáveis para a síntese de compostos de elevado valor acrescentado a partir de biomassa*, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023. [Orientação: Laranjo, M., Pineiro, M.]
43. Elisa Irene Branquinho Foulquié. *Mediterranean plants for health: Achillea maritima and its biological properties*, Mestrado em Bioquímica, Universidade de Coimbra, 2023.
[Orientação: D.C. Vaz, M. Castro]
44. Telma Sofia Rodrigues Orvalho. *Avaliação físico-química, nutricional e microbiológica de pólen apícola submetido a diferentes processos de conservação*, Mestrado em Gestão da Qualidade e Segurança Alimentar, Instituto Politécnico de Leiria, 2023.
[Orientação: D.C. Vaz, V. Ribeiro]
45. Victor Santos de Paiva. *Cinética e termodinâmica da interação de fármacos com albumina sérica*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2023.
[Orientação: M.J. Moreno]

BSc Thesis (52)

1. Martim Rodrigues dos Santos. Conformational analysis of arginine methylated and dimethylated and serine phosphorylated in silico, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: J. M. C. Marques, P. E. Abreu]
2. Maria Leonor Pinheiro Freixo Solteiro Pires. Estudo da interação da histamina com a lisina metilada, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: P. E. Abreu, J. M. C. Marques]
3. Érica Nazaré Santos Esteves, *Difusão molecular em sistemas químicos a pressões elevadas*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação C. Santos].
4. Rita Ferreira da Silva, *Difusão em materiais poliméricos de aplicação industrial - Estudo da na borracha EPDM*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação C. Santos].
5. Afonso Nogueira Cardoso, *Difusão da isoniazida em diferentes meios*, Estágio Laboratorial do I ° ano do 2° ciclo, Departamento de Química, Faculdade de Ciências, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: A.C.F. Ribeiro].
6. Fábio Yukeny Paulo Afonso, *Calibração e quantificação: verificação da exatidão e precisão de equipamentos e ensaios*, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: J. Costa Pereira]
7. Francisco Maria Ferraz Viegas Damásio, *In Silico Approach in Reviewing Blood-Brain Barrier Permeability*, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: J. Costa Pereira]
8. Ana Maria Marques Nunes da Silva, *Dispositivo Médico à base de plantas, com atividade hemostática para hemofílicos. Sim ou não?*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: M. G. Campos]
9. Beatriz Rosa Filipe, *Investigação translacional em polifenóis com potencial para melhorar a síndrome metabólica*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: M. G. Campos]
10. Matilde Alexandra Coelho Vilhena, *Consumo de plantas medicinais na forma de infusões e decocções por doentes crónicos*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: M. G. Campos]
11. Beatriz Nunes. *Estudo de oligoelectrólitos conjugados em ambiente celular através de microscopia temporalmente resolvida*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: Telma Costa. Co-Orientação: J. S. Seixas de Melo]
12. Beatriz Mouta. *FLIM Characterization of Highly Selective Fluorescent Sensors Based on Polyethylenimine-Triphenylamine Derivatives for ATP, GTP and G-quadruplex*, Licenciatura em Engenharia Biomédica, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: J. S. Seixas de Melo; Co-Orientação: Telma Costa]
13. Tiago Ribeiro. *FLIM study on the interaction between polyethylenimine (PEI) derivatives with 7-hydroxy-4-methyl-coumarin (COU) or alternating COU / triphenylamine TPA moieties and DNA-like bases (ATP AND GTP) and some G-quadruplexes*, Licenciatura em Engenharia Biomédica, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: J. S. Seixas de Melo; Co-Orientação: Telma Costa]
14. Ângela Marques. *Síntese de novos fluoróforos com aplicação na captação de energia solar*, Licenciatura em Engenharia Biomédica, Universidade de Coimbra, 2023

[Orientação: Ana Clara Beltran Rodrigues]

15. Francisca Pessoa. Análise espectral e fotofísica de selos de estados alemães antes e após unificação: 1850-1872, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: J. S. Seixas de Melo]

16. Diana Ramos. “Agentes de Contraste para Tomografia Fotoacústica”. Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: L. G. Arnaut]

17. Margarida A. Vilar. “Influence of Light Wavelength on Cellular Viability and Type of Cell Death After Photodynamic Therapy” Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: F. A. Schaberle]

18. Bruna Fonseca. “Evaluation of parthanatos after photodynamic therapy with LUZ51”, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: L. C. Gomes-da-Silva]

19. Alexandra Lemos, “Mechanisms of autophagy triggered by photodynamic therapy with LUZ51”, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: L. C. Gomes-da-Silva]

20. Ana Toscano. “Contribuição do Iodeto de Potássio para a Terapia de Inativação Fotodinâmica em Bactérias *S. aureus* e *E. coli* utilizando uma clorina catiónica como Fotosensibilizador”. Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: L. G. Arnaut]

21. Maria Pedro, “Permeação cutânea de formulações anti-envelhecimento: desenvolvimento e estudos *in vitro* de uma formulação tópica contendo GHK-Cu”, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: C. serpa; Co-orientação: Sofia Guímaro]

22. Juliana Cebola, "Síntese e caracterização de fotossensibilizadores", Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: M.M. Pereira; Co-orientação: Sara M.A. Pinto]

23. A. Joaquim, Síntese de uma porfirina de paládio com potencial aplicação como sensor de oxigénio. Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: S.M.A. Pinto; Co-orientação: R.M.B. Carrilho]

24. Bárbara Espósito, "Catalisadores Heterogéneos de Fonte Renovável para Captura e Transformação de CO₂ em Produtos de Química Fina", Licenciatura em Química Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: R.M.B. Carrilho; Co-orientação: M.J.F. Calvete]

25. Madalena Cunha e Silva, in framework of non-conferring degree course “Metodologias de Investigação Científica”, July 2023 – September 2023, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: R.M.B. Carrilho]

26. Inês Freitas Cardoso, Caracterização Espetroscópica de Carboidratos e Desenvolvimento de Modelos Quimiométricos para a sua Identificação em Misturas, Relatório de Estágio, Química Medicinal, Departamento de Química, FCTUC, 2023
[Orientação: Fausto, R.; Brito, A.L.B.]

27. Catarina Alexandra Ferreira Duarte, Análise de Bebidas Vegetais Substitutas do Leite Usando Espetroscopia de Infravermelho e Métodos Quimiométricos, Relatório de Estágio, Química Medicinal, Departamento de Química, FCTUC, 2023
[Orientação: Fausto, R.; Brito, A.L.B.]

28. Tatiana Isabel Cordeiro Caneca, *Investigação de Portas de Acesso à Geração e Caracterização de Carbenos de Triazóis Simples em Matrizes Criogénicas: Estudo Chave para Organocatálise de Carbeno N-Heterocílico*, Departamento de Química, FCTUC, 2023.
[Orientação: Nunes, C.M.]
29. Inês Bettencourt Almeida, *Estudo da Formação de Co-cristais com o Ativo Farmacêutico Nimesulide*, Licenciatura em Química, Departamento de Química, Universidade de Coimbra
[Orientação: Eusébio, M.E.S.]
30. Milene Sofia Coutinho Costa, *Pesquisa de novas formas sólidas de clorzoxazona*, Licenciatura em Química, Departamento de Química, Universidade de Coimbra
[Orientação: Rosado, M.T.S.; Silva, J.F.C.]
31. Alice Pinto Jerónimo, *Investigação do estado sólido da leflunomida*, Licenciatura em Química, Departamento de Química, Universidade de Coimbra
[Orientação: Maria, T.M.R.]
32. Tiago Pinheiro de Freitas Paiva e Costa, *Near-infrared Photoimmunotherapy for solid cancers: A combined selective cell killing and immune activation therapy*, Monografia, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: Castro, R.A.E.]
33. Maria Catarina Batalim Tudela de Azevedo, *Auvelity®: A breakthrough in the world of clinical depression?* Monografia, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: Castro, R.A.E.]
34. Ana Rita Freitas Oliveira Magano, *Avanços na terapia da Esclerose Múltipla com Anticorpos Monoclonais*, Monografia, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: Castro, R.A.E.]
35. Sandrina Carole Almeida Santos, *A controvérsia entre o tratamento da diabetes e o tratamento da obesidade*, Monografia, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: Canotilho, J.]
36. Beatriz China Rodrigues, *O papel do farmacêutico na promoção da saúde pública e a aplicação dos princípios bioéticos na farmácia (veterinária)* Monografia, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: Canotilho, J.]
37. Andreia Filipa Ferreira Bacelar, *Carcinoma espinocelular felino e a importância da proteção solar na sua prevenção* Monografia, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: Canotilho, J.]
38. Henrique Faria Pinto Cruz de Oliveira, *Ciência de Dados Aplicados a Problemas Biomédicos: Tomografia Computorizada*, Licenciatura em Engenharia Biomédica-Bioelectrónica, ISEC-IPC, 2023
[Co-supervisor: P.J.S.B. Caridade]
39. Filipe S. Carvalho, *Algoritmos de inteligência artificial aplicados a visão computacional: Segmentação de tumores cerebrais*, CTESP em Instrumentação Biomédica, ISEC-IPC, 2023
[Co-supervisor: P.J.S.B. Caridade]
40. Carlos Cortez, *Algoritmos de inteligência artificial aplicados a visão computacional*, CTESP em Instrumentação Biomédica, ISEC-IPC, 2023
[Co-supervisor: P.J.S.B. Caridade]

41. Catarina Caldeira, “Development of Machine Learning Algorithms for Air Pollution Modelling”, Equal.STEAM immersion, Universidade de Coimbra, 2023
[Supervisor: P.J.S.B. Caridadade].
42. Pedro Miguel Mota Sá, *Síntese de novas espiro-β-lactamas com atividade antimicrobiana: estudo de condições de reação em fluxo contínuo*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D., Alves, A.]
43. Bruno José Lourenço Castro, *Novel spiro-β-lactamas as broad-spectrum antivirals*, , Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D., Alves, A., Alves, N.]
44. Tomás Domingues, *Desenvolvimento de agentes para imagiologia de fluorescência para deteção e visualização in vitro de múltipas entidades subcelular*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D., Simões, J.]
45. Joana Catarina Santos Campanhã, *Reações de Henry catalisadas por derivados de quitosano*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: Murtinho, D.]
46. Jesús Tapia Palma, *Reducción de cetonas utilizando silanos y catalizadores organometálicos*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2023. [Orientação: Murtinho, D.]
47. Ricardo Casaleiro, *Transformações mecanoquímicas de furanos: metodologias sustentáveis para a síntese de compostos de elevado valor acrescentado a partir de biomassa*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: Cardoso, A. L.]
48. Ana Luísa, *Avaliação do potencial hipocolesterolémico de extractos lipídicos da microalga Tetraselmis chuii*, Licenciatura em Biotecnologia, Universidade de Aveiro, 2023
[Orientação: Filipe Coreta Gomes, Ana Moreira]
49. Ana Margarida Gândara. *Preparação e caracterização físico-química de hidrogéis de PEG-BSA*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: M.J. Moreno, D. C. Vaz]
50. Inês Morgado, *Avaliação in vitro do efeito hipocolesterolémico de quitosana comercial de baixo peso molecular*, Licenciatura em Biotecnologia, Universidade de Aveiro, 2023
[Orientação: Filipe Coreta Gomes, Cláudia Nunes]
51. João Teixeira, *Os polissacarídeos da fistulina hepática e as suas propriedades hipocolesterolêmicas*, Licenciatura em Bioquímica, Universidade de Aveiro, 2023
[Orientação: Filipe Coreta Gomes, Elisabete Coelho]
52. Luísa L. Medeiros. *Síntese e Purificação de um derivado do DOTA-C4*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2023
[Orientação: M.J. Moreno, M. Piñeiro]

Technical Reports (4)

1. Caridade, P.J.S.B., CITIES2030: Data security for S2CP, Cities2030 (101000640) consortium under the supervision of the project's coordinator (2023, European Commission).
2. Caridade, P.J.S.B., CITIES2030: S2CP Dashboard, Cities2030 (101000640) consortium under the supervision of the project's coordinator (2023, European Commission).
3. R.M.B. Carrilho, Relatório técnico e de atividades do Projeto “CO2BioFilter - Bio-Filter for Carbon Dioxide Capture and Valorization: A Sustainable Approach towards Environment, Health and Circular Economy” (Projeto Semiente 2022, UC/Santander), Abril 2023.
4. R.M.B. Carrilho, Relatório técnico e de atividades do Projeto “Educaplast - A problemática da poluição por microplásticos e o desenvolvimento de bioplásticos como alternativa de futuro: comunicar e envolver a Sociedade” (Fundo Ambiental), Novembro 2023

Lab Prototypes_ Software (1)

1. Caridade, Pedro J. S. B., *Air pollution quantification based on satellite imagery netcdf format (big data approaches, v1.5)* (2023–, GNU2 licence).
<https://github.com/pcaridade/cams>

Patents (11)

1. Water-soluble tryptantrin derivatives for redox flow batteries

Inventors: M. Piñeiro, D. Pinheiro, J. Sérgio Seixas de Melo

US Patent App: 18/026,275

2. Hybrid nanoparticles as multifunctional platform for brain tumor therapy

International Application Number: PCT/IB2023/060125

International filing date: 09/10/2023

Inventors: Maria Mendes, João Sousa, Alberto Pais, Maria António, Ana Silva, Carla Vitorino

Requerente: Universidade de Coimbra

3. Topical composition and uses thereof

International Application Number: PCT/IB2023/057222

International filing date: 14/07/2023

Inventors: Maria Cruz, Gonçalo Brites, Isabel do Vale, Ana Silva, Carla Vitorino, Margarida Gonçalo, Bruno Neves

Requerente: Universidade de Coimbra

4. Novel photosensitive carbon dioxide based polycarbonate derivatives and method for preparation of photoantimicrobial polycarbonate-bioplasticizer composites and their use

Inventors: R.M.B. Carrilho, M.M. Pereira, A.C.S. Gonzalez, R. T. Aroso, G. Piccirillo, F.M.S. Rodrigues,

Patent Application (2023) PT20232005141759

5. NOVEL SPIRO-LACTAM COMPOUNDS, PROCESS AND USES THEREOF

Inventors: T. M. V. D. Pinho e Melo, B. S. Santos, I. I. F. Bártolo, R. M. P. Pignatelli, N. E. M. S. C. Taveira.

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

Patent Nº: US2023/0285366 (**A1**); Publication Date: 14.09.2023

6. NOVEL SPIRO-LACTAM COMPOUNDS, PROCESS AND USES THEREOF

Inventors: T. M. V. D. Pinho e Melo, B. S. Santos, I. I. F. Bártolo, R. M. P. Pignatelli, N. E. M. S. C. Taveira.

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

Patent Nº: US20200352916 (**B2**); Publication Date: 06.06.2023

7. 2-THIOXOTHIAZOLIDIN-4-ONE DERIVATIVES ACTIVE AS TRANSTHYRETIN LIGANDS AND USES THEREOF.

Inventors: R. M. P. M. F. Brito, C. J. V. Simões, T. M. V. D. Pinho e Melo, B. L. S. Victor, Z. C. L. Almeida, A. L. C. C. Lopes, B. F. O. Nascimento. Applicants: BSIM2 – Biomolecular Simulations LDA

Patent Nº: US 11,584,727 **B2**; Publication Date: 21.02.2023

8. Método de obtenção de betainato de amido.

Inventores: A.J.M. Valente, P.J.T. Ferreira, D.M.B. Murtinho, R. J. A. Garcia, M. Sharma, A.F.M. Lourenço.

Patente portuguesa Nº: PT 117053A. WO2022168011A1. Data de Publicação: 17.01.2023.

9. NOVEL SPIRO-LACTAM COMPOUNDS, PROCESS AND USES THEREOF

Inventors: T. M. V. D. Pinho e Melo, N. E. M. S. C. Taveira, N. A. G. Alves, A. J. S. Alves, I. I. F. Bártolo.

Applicants: Universidade de Coimbra, Faculdade de Farmácia da Universidade de Lisboa, Egas Moniz – Cooperativa de Ensino Superior, CRL.

Provisional Patent Application (Portugal). Date: 17.11.2023

10. Brito, R. M. M., Simões, C. J. V., Melo, T. P., Victor, B. L., S., Almeida, Z. C., Lopes, A. L., Nascimento, B. F. O. 2-thioxothiazolidin-4-one derivatives active as transthyretin ligands and uses thereof. US Patent 11584727, Feb. 21, 2023.

CQC – Overall Output Indicators 2023

II.. Manuel A. Coimbra, Elisabete Coelho, Ana Silva, Filipe Coreta-Gomes, *Frações ativas obtidas por fracionamento granulométrico da pele de pinhão, métodos e seus usos*, Pedido de patente de invenção, PT 118116 A, Universidade de Aveiro, 2023.

Conference / Journal Proceedings (12)

1. Gonçalves, R. C., Pinto, S. C., Pina, J., Gomes-da-Silva, L. C., Costa, S. P., Raposo, M. M. M., *Investigating the Photophysical Properties and Biological Efficacy of BODIPY Derivatives as Photosensitizers in Photodynamic Therapy*, Chemistry Proceedings, 14(1), 71, 2023.
DOI: 10.3390/ecsoc-27-16094
2. Basso, J., Fortuna, A., Vitorino, R & Vitorino, C. Precision meets affordability: A highly sensitive HPLC-FLD technique for accurate pitavastatin quantification in human plasma. The 2nd International Electronic Conference on Chemical Sensors and Analytical Chemistry. 16th - 30th September, 2023. (<https://doi.org/10.3390/CSAC2023-14931>)
3. Rodrigues. S.P.J. *Evolução de Grandes Ideias em Química, História da Ciência e Ensino construindo interfaces* 27 (especial), 275-281, 2023.
DOI: 10.23925/2178-2911.2023v17espp275-281
4. Lamanna, R., Martins, D.R., Casaleiro, P., Rodrigues, S.P.J., *Banda desenhada como ferramenta didática: História da Ressonância Magnética em Portugal*, História da Ciência e Ensino construindo interfaces 27 (especial), 266-274, 2023.
DOI: 10.23925/2178-2911.2023v17espp266-274
5. Peres, I.M., Rodrigues, SP.J., Elvas, M.C. Júlio Máximo de Oliveira Pimentel e o início do Ensino da Química na Escola Politécnica de Lisboa – Um estudo de Cultura Material.” História da Ciência e Ensino construindo interfaces 27 (especial), 231-248, 2023.
DOI: 10.23925/2178-2911.2023v27espp231-248
6. Carvalho, F.S., Caridade, P.J.S.B., Bigotte de Almeida, E., Vasconcelos, V., Detection of Traffic Signs and Segmentation of Brain Tumors in Magnetic Resonance Images - Computer Vision Applications, 29th Portuguese Conference on Pattern Recognition, Coimbra, Portugal, 2023.
7. Paiva, V., Coelho, C., Jesus, J., Gândara, A.M., Almeida, Z., Lagoa, R., Vaz, D.C., Moreno, M.J., *In vitro enzymatic degradability of PEG-BSA biofilms*. In Livro de Resumos - X Congresso da Sociedade Portuguesa de Biomecânica. Amaro, Roseiro et al. (Eds), pp. 215-216, 2023.
ISBN: 978-989-33-4641-9.
8. Raquel C. R. Gonçalves, Sónia C. S. Pinto, J. Pina, Lígia C. Gomes-da-Silva, Susana P. G. Costa, M. Manuela M. Raposo “*Investigating the Photophysical Properties and Biological Efficacy of BODIPY Derivatives as Photosensitizers in Photodynamic Therapy*”. Chemistry Proceedings. 14, 71, 2023.
DOI: <https://doi.org/10.3390/ecsoc-27-16094>
9. R. M. B. Carrilho, I. G. Cruz, A. F. Peixoto, F. S. Ferreira, J. M. Gil, M. M. Pereira, "Biomass-derived carbonaceous materials as renewable catalysts for carbon dioxide fixation into cyclic carbonates", The World Conference on Carbon – Conference Proceedings, 2023, 512 (Topic 6. Catalysis), 1084-1090
10. Serambeque, B., Carvalho, M. J., Correia-Barros, G., Pereira, N. A. M., Gonçalves, A. C., Pineiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., Laranjo, M., *Exploring Ring-fused Chlorins Based Photodynamic Therapy as a Conservative Approach for Endometrial Cancer*, Mol. Oncol., 17, pp 380, 2023.
DOI: 10.1002/1878-0261.13469
11. Gonçalves, A. C., Ribeiro, I., Marto, C. M., Serambeque, B., Pineiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., Laranjo, M., *Ring-fused Chlorins are Effective Photosensitizers for Oral Squamous Cell Carcinoma Treatment*, Mol. Oncol., 17, pp 381, 2023.
DOI: 10.1002/1878-0261.13469

CQC – Overall Output Indicators 2023

12. Machado, F., Gómez-Domínguez, I., Hurtado-Ribeira, R., Martin, D., Coimbra, M.A., del Castillo, M.D., Coreta-Gomes, F., *Colonic Fermentation of Coffee Melanoidins and Resulting Cardioprotective Metabolites*, Proceedings 2023, 89. Art. N. 19, 2023.
DOI: 10.3390/ICC2023-14836.

Other Publications (4)

1. Arnaut, L.G., Pais A.A.C.C., Fausto, R., *Hugh Douglas Borrows - Obituary*, J. Mol. Struc., 1292, Art. N° 135969, 2023.
DOI: [10.1016/j.molstruc.2023.135969](https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2023.135969)

2. Krol, M., Drodz, M., Stoch, P., Baranska, M., Fausto, R., Gordon, K., *From Molecules to Functional Materials: A Collection of Contributions Presented at the XVIth International Conference on Molecular Spectroscopy*, Spectrochim. Acta, Part A: Molecular Spectroscopy and Biospectroscopy, 303, Art. N° 123148, 2023.
DOI: [10.1016/j.saa.2023.123148](https://doi.org/10.1016/j.saa.2023.123148)

3. Sipos, P., Tarczay, G., Fausto, R., *Prof. István Pálinkó (1959–2021) – The University Citizen*, J. Mol. Struct., 1272, Art. N° 134190, 2023.
DOI: [10.1016/j.molstruc.2022.134190](https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2022.134190)

4. Baranska, M., Fausto, R., Gordon, K., *From Molecules to Functional Materials: A Collection of Contributions Presented at the XVIth International Conference on Molecular Spectroscopy*, J. Mol. Struct., 1293, Art. N° 136198, 2023.
DOI: [10.1016/j.molstruc.2023.136198](https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2023.136198)

Awards / Distinctions (16)

1. M.M. Pereira, **Honoris Causa** atribuído pela Universidade de Pécs, Hungria (2023).
2. M.M. Pereira, **Guest Scientist Fellowship 2023** atribuído pela Academia das Ciências Hungara (NKFIH).
3. NeWLOife- *Regeneration of used lubricant oil by supercritical CO₂ - a process towards circular economy and environmental healthl*, Cecilia I.A.V. Santos, **Projetos Semente de Investigação** - Universidade de Coimbra, Fundação Santander e Instituto de Investigação Interdisciplinar
4. AeroNaLyte Silica-Polymer Composite Aerogels As Solid Sodium Electrolytes, J.P.C. Vareda (PI), A.C. Fonseca, A.D.R. Pontinha, A.C.F. Ribeiro, Projetos Semente de Investigação – Universidade de Coimbra, Fundação Santander e Instituto de Investigação Interdisciplinar – **Projeto Vencedor 2023 (Clima, Energia e Mobilidade)**
5. **8th PYChem Best Poster Award.** N. Tavares, D. Monteiro, U. Marques, C. Jesus, A. Alves, H. Filipe, F.E. Antunes, 2023.
6. Domingues, C., Jarak, I., Veiga, F., Dourado, M., Vitorino, C., Figueiras, A. *Sprawling Oral Cancer treatment using mixed Pluronic®-based nanosystems*. X Congresso Iberoamericano Ciências Farmacêuticas, Coimbra, 26-28th October 2023 ▼ **Prémio de melhor comunicação em painel**.
7. Basso, J., Fortuna, A., Vitorino, R. & Vitorino, C. *Unveiling the molecular mechanisms of pitavastatin induced glioblastoma death using proteomics*, PharmahDay 2023 | Annual Meeting of PhD Students in Pharmaceutical Sciences, Coimbra, Portugal, 24th November, 2023, ▼ **Prémio de melhor comunicação em painel**.
8. Basso, J., Sousa, J., Vitorino, R., Fortuna, A. Vitorino, C. *Breaking Barriers: optimizing drug delivery in glioblastoma with nanostructured lipid carriers*. X Iberoamerican Congress of Pharmaceutical Sciences, Coimbra, Portugal, 26 – 28th October, 2023. **Best Oral Presentation Award**
9. *Projeto 3BBBioprinting: 3D-bioprinting of blood brain barrier for modeling lipid nanoparticle access to brain tumours*, C. Vitorino, M. Mendes, J.J. Sousa, T. Cova, S. Nunes, A. Fortuna, J. Basso, J. Catita. **Concurso de Provas de Conceito UC by Santander Universities**
10. Rui M. B. Carrilho, “CO₂PhotoBioPlas – Photosensitive carbon dioxide-based polycarbonate derivatives and photo-antimicrobial polycarbonate bioplasticizer composites”, **Projeto vencedor do Concurso Provas de Conceito UC Santander 2023**.
11. Z.A. Arnaut, A.P. Felgueiras, V. Masliy, **1º Lugar no 2º Concurso Nacional de Retrossíntese da Sociedade Portuguesa de Química**, UTAD, Vila Real, Portugal.
12. *Experimental and computational investigation of polymorphs and solvates of probucol*, Baptista, J.A., Castro, R.A.E., Canotilho, J., Ciattini, S., Santos, J.C., Marques, J.M.C., Rosado, M.T.S., Eusébio, M.E.S., JEEP 2023, Journées d'Etude des Equilibres entre Phases, Rouen, France, 2023. (**Prize for the 2nd best oral communication**)
13. Rodrigues, A. C., Lopes, S. M. M., Cunha, C., João Braz, J., Pinho e Melo, T. M. V. D., Seixas de Melo, J. S., Pineiro, M., *The Role of the Solvent and Concentration on the Properties of Oxime Bearing A₂B Corroles*, Phys. Chem. Chem. Phys., 25, pp 10263-10277, 2023. **Cover Picture – Issue 15** [<https://pubs.rsc.org/en/journals/journalissues/cp#issueid=cp025015&type=current&issnprint=1463-9076>]
14. Geraldes, C.F.G.C., **1.º Prémio Frausto da Silva, Sociedade Portuguesa de Química**
15. *Removal of aberrant aggregates in amyloid diseases: from in silico analysis to in vitro biological activity*, Zaida L. Almeida, Rui M. M. Brito., ACS Publications Symposium | Biological and Medicinal Chemistry, March 6-8, 2023, Bonn, Germany – **Best Poster Communication**.

16. *Interaction of Two Commercial Azobenzene Food Dyes, Amaranth and New Coccine, with Human Serum Albumin: Biophysical Characterization.* Otávio A. Chaves, Rui J. S. Loureiro, Andreia Costa-Tuna, Zaida L. Almeida, João Pina, Rui M. M. Brito, Carlos Serpa. ACS Food Science & Technology, 3(5), 955–968. DOI: 10.1021/acsfoodscitech.3c00125 – **Front Cover Image Winner.**