

## CQC - INDICADORES DE DESEMPENHO CIENTÍFICO - 2021

### LIVROS E CAPÍTULOS DE LIVROS PUBLICADOS OU EDITADOS

1. Ildiz, G. O., Bayari, S., Yorguner, N., Fausto, R., *Blood Serum Infrared Spectra Based Chemometric Models for Auxiliary Diagnosis of Autism Spectrum Disorder*, in *Neural Engineer Techniques for Autism Spectrum Disorder*, El-Baz, A. S., Mahmoud, A., Eds., Volume 1: Imaging and Signal Analysis, Elsevier, Amsterdam (Holland), Cap. 10, pp 185-213.  
ISBN: 9780128228227.
2. Nunes, C. M., Reva, I., Fausto, R., *Direct Observation of Tunneling Reactions by Matrix Isolation Spectroscopy* In *Tunnelling in Molecules: Nuclear Quantum Effects from Bio to Physical Chemistry*; Kästner, J. and Kozuch, S. Eds.; Royal Society of Chemistry, Cambridge (UK), Cap. 1, pp 1–60.  
eISBN: 978-1-83916-037-0.
3. Fausto, R., Nikitin, T., Brás, E. M., *Light Induced Reactions in Cryogenic Matrices*, in *Photochemistry: A Specialist Periodic Report*, RSC Publishing, London (UK), vol. 49, pp 53-108.  
ISBN: 978-1-83916-388-3
4. *Molecules* (Special Issue on “Molecular Spectroscopy and Molecular Structure: Commemorative Issue in Honor of Professor Austin J. Barnes on Occasion of his 75th Birthday”), Eds. Fausto, R., Turrell, S., Ildiz, G. O., MDPI, Basel (Switzerland), 2021.  
[https://www.mdpi.com/journal/molecules/special\\_issues/moleclar\\_struc](https://www.mdpi.com/journal/molecules/special_issues/moleclar_struc)
5. *Molecules* (Special Issue on "Exclusive Papers from Editorial Board Members of the Photochemistry Section of Molecules"), Eds. Fausto, R., Reed, S., MDPI, Basel (Switzerland), 2021.  
[https://www.mdpi.com/journal/molecules/special\\_issues/photo\\_EBs](https://www.mdpi.com/journal/molecules/special_issues/photo_EBs)
6. *J. Mol. Struct.* (Special Issue on “Molecular Structure and Analytical and Bioanalytical Research: A Collection of Selected Contributions Presented at the International Conference on Analytical and Bioanalytical Methods – San Francisco 2020”), Eds. Fausto, R., Muller, G., Perretti, G., Ildiz, G. O., Elsevier, Amsterdam (Holland), 2021.  
<https://www.sciencedirect.com/journal/journal-of-molecular-structure/special-issue/104WCZX6P4K>
7. *J. Mol. Struct.* (Special Issue on “Bridging Molecules and Nanoparticles - The Way from Optical Spectroscopy to Cancer Therapy”), Eds. Fausto, R., Chis, V., de la Chapelle, M. L., Focsan, M., Elsevier, Amsterdam (Holland), 2021.  
<https://www.sciencedirect.com/journal/journal-of-molecular-structure/special-issue/10B4SZWTMCS>
8. *J. Mol. Struct.* (Special Issue on “Molecular Structural Aspects of Corrosion Inhibitors for Metal Protection”), Eds. Fausto, R., El Ibrahimy, B., Bazzi, L., Ouraishi, M. A., Alsaadi, A., Ildiz, G. O., Elsevier, Amsterdam (Holland), 2021.  
<https://www.sciencedirect.com/journal/journal-of-molecular-structure/special-issue/10CW9LHXFB0>

9. J. Mol. Struct. (Special Issue on “Chemistry in a Confined Space: A Collection of Selected Communications Presented at the European Meeting on Physical Organic Chemistry, Wrocław-Karpacz, Poland”), Eds. Fausto, R., Orzechowski, K., Elsevier, Amsterdam (Holland), 2021.  
<https://www.sciencedirect.com/journal/journal-of-molecular-structure/special-issue/10KH2PDJ671>
10. J. Mol. Struct. (Special Issue on “From Structure of Complexes to Structural Aspects of Catalysis - in Honor of István Pálinkó”), Eds. Tarczay, G., Sipós, P., Fausto, R., Elsevier, Amsterdam (Holland), 2021.  
<https://www.sciencedirect.com/journal/journal-of-molecular-structure/special-issue/10F133WR6JP>
11. J. Mol. Struct. (Special Issue on “Nanoarchitectonics: From Molecules to Advanced Nanomaterials”), Eds. Pal, K., Thomas, S., Fausto, R., Elsevier, Amsterdam (Holland), 2021.  
<https://www.sciencedirect.com/journal/journal-of-molecular-structure/special-issue/10WFCOXPRG6>
12. J. Mol. Struct. (Special Issue on “Materials Science and Nanotechnology 2019”), Eds. Ekicibil, A., Çağlar, Y., Canbay, C. A., Fausto, R., Elsevier, Amsterdam (Holland), 2021. (Cover by Fausto, R.)  
<https://www.sciencedirect.com/journal/journal-of-molecular-structure/special-issue/10QXFP9HB27>
13. Results in Chemistry (Special Issue on “Results in Molecular spectroscopy”), Eds. Fausto, R., Reid, S., Elsevier, Amsterdam (Holland), 2021.  
<https://www.journals.elsevier.com/results-in-chemistry/call-for-papers/results-in-molecular-spectroscopy>
14. J. Mol. Struct. (Special Issue on “Vibrational Spectroscopy in Materials Research - A Special Issue in Honor of Professor Mirosław Handke”), Eds. Krol, M., Abramczyk, H., Fausto, R., Elsevier, Amsterdam (Holland), 2021.  
<https://www.sciencedirect.com/journal/journal-of-molecular-structure/special-issue/10G2Z1JWSL0>
15. Photochem (Special Issue on “Theme Issue in Honor of Prof. Maciej J. Nowak, for His Contributions to the Field of Photochemistry of Matrix-Isolated Species”), Eds. Kólos, R., Fausto, R., MDPI, Basel (Switzerland), 2021.  
[https://www.mdpi.com/journal/photochem/special\\_issues/Matrix\\_Isolated](https://www.mdpi.com/journal/photochem/special_issues/Matrix_Isolated)
16. Frontiers in Materials (Special Issue on “Application of Sustainable Materials for Anti-Corrosion and Anti-Scaling Purposes”), Eds. El Ibrahimy, B., Fausto, R., Guo, L., Ildiz, G. O., Kaya, S., Springer, New York (USA), 2021.  
<https://www.frontiersin.org/research-topics/24426/application-of-sustainable-materials-for-anti-corrosion-and-anti-scaling-purposes>
17. Photochem (Special Issue on “Photochemistry of Organic Molecules and of Matrix-Isolated Reactive Intermediates: Themed Issue Honoring Professor Rui Fausto for His Contributions to the Field”), Eds. Ildiz, G. O., Justino, L. L. G., MDPI, Basel (Switzerland), 2021.  
[https://www.mdpi.com/journal/photochem/special\\_issues/Rui\\_Fausto](https://www.mdpi.com/journal/photochem/special_issues/Rui_Fausto)

18. Eusébio, M. E. S., Castro, R. A. E., Canotilho, J., *Drug Nanocrystals*, em *Nanoparticles for Brain Drug Delivery* (Eds. Vitorino, C., Jorge, A., Pais, A., Jenny Stanford Publishing, Singapore, Cap. 7, pp. 211-255, 2021.  
ISBN 978-981-4877-31-2
19. Arnaut, L. G., "*Chemical Kinetics*", 2<sup>nd</sup> Ed. Elsevier, Amsterdão (Holanda), pp. 1-600, 2021.  
DOI: 10.1016/C2016-0-04391-7  
ISBN: 9780444640390
20. Pereira, M. M., Carrilho, R. M. B., Calvete, M. J. F., *Tervalent Phosphorus Acid Derivatives*, in *Organophosphorus Chemistry Volume 50-Specialist Periodical Reports Series*, Allen, D. W., Loakes D., Tebby, J. C. Eds., Royal Society of Chemistry Books, Cambridge, Chap 2, pp 115-149, 2021.  
DOI: 10.1039/9781839163814-00115  
ISBN: 978-1-83916-205-3
21. Santos, A. L., Rola, Ana I. S., Morais, C., Vasconcelos, C., Gomes, E. M. C., Rodrigues, I. T., Azevedo, J., Rodrigues, S. P. J., (Eds.) *História da Ciência no Ensino. Revisitando Abordagens, Inovando Saberes*. Imprensa da Universidade de Coimbra. 2021.  
ISBN: 978-989-26-1779-4  
DOI: 10.14195/978-989-26-1780-0
22. Rodrigues, S. P. J., Tratamentos com medicamentos ou terapias não-farmacológicas? O que sabemos e o que não sabemos (na visão de um químico). In *História Interdisciplinar da Loucura, Psiquiatria e Saúde Mental XI*, pp. 347-356. Coimbra, Portugal: Sociedade de História Interdisciplinar da Saúde -SHIS, 2021.  
ISBN: 978-989-54537-7-1
23. Caridade, P. J. S. B., Serpa, C., Rodrigues, S. P. J., "Kinetics and Modeling of Molecular Reactions", (Eds.), Special Issue of Applied Sciences (2021). ISSN 2076-3417.
24. Pinto, C., Seixas de Melo, J. S., *História da Ciência no Ensino. Revisitando Abordagens, Inovando Saberes*, Imprensa da Universidade de Coimbra, Capítulo 5, pp.73-99, 2021.  
ISBN: 978-989-26-1780-0.
25. Seixas de Melo, J. S., *The molecules of colour. The real blue indigo: photostability mechanisms, new functional derivatives, and hybrids*, J. Photochemistry, 2021.  
ISSN: 1465-1947
26. Barros, M. C. F., Ribeiro, A. C. F., Santos, C. I. A. V., *Thermodiffusion on the Fontainebleau Benchmark Mixture: An Overview* ", in *Optical and Molecular Physics- Theroretical Principles and Experimental Methods*, M. A. Estesó, A. C. F. Ribeiro, A.K. Haghi (Eds.), Apple Academic Press, Inc./CRC, New Jersey, Chapter 15, 2021.  
ISBN-9781003150053
27. Consul, R., Lucas F., Campos, M. G., *Ayahuasca: Inherent Dangers in Its Consumption*. In "*Wild Plants: The Treasure of Natural Healers*" (Eds: Mahendra Rai and Shandesh Bhattarai), Ed.by CRC press USA. Chapter 16, pp 401-424, 2021. Ed. Taylor & Francis Group  
DOI: 10.1201/9781003020134; eBook ISBN 9781003020134

28. Campos, M. G., Barreto, L. M. R. C., Nordi, J. C., Chica, M., Campoy, P., Nozkova, J., Almaraz-Abarca, N., Živoslav, Tešić, Lj., Mosić, M. D., Kostić, A. Z., Pešić, M. B., Milojković-Opsenica, D. M., Sickel, W., Ankenbrand, M. J., Grimmer, G., Steffan-Dewenter, I., Keller, A., Förster, F., Ch, T., Liolios, V., Kanelis, D., Rodopoulou, M., Thrasyvoulou, A., Paulo, L., Lucchetti, M. A., Kast, C., Glauser, G., Pascoal, A., Tolentino, G. S., Estevinho, L. M., Muradian-Bicudo, L., Carreck, N.. *Standard methods for Bee pollen research*. In V Dietemann; J D Ellis; P Neumann (Eds) The COLOSS BEEBOOK, Volume III: Standard methods for Apis mellifera bee products research. Journal of Apicultural Research: SPECIAL ISSUE Journal of Apicultural Research, 60:4, pp 1-109, 2021. www.coloss.org/beebook, VOL III, 2021 (in press). DOI: 10.1080/00218839.2021.1948240
29. Utzeri, G., Verissimo, L. M. P., Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., *Pesticides and their environment and health impact: An approach on remediation using hydrogels*, in *Theoretical and empirical analysis in physical chemistry: A framework for research*, M.A. Estes, A.C.F. Ribeiro, A.K. Haghi (Eds.), Apple Academic Press, Inc./CRC, New Jersey, Chapter 7, 2021. ISBN: 978-1-77188-856-1
30. Ribeiro, A. C. F., Verissimo, L. M. P., Valente, A. J. M., Andrade, S. C. G. S., Cabral, A. M. T. D. P. V., Estes, M. A. *Theoretical Values of Diffusion Coefficients of Electrolytes in Aqueous Solutions: Important Parameters with Application in Fundamental and Technological Areas*, in *Optical and Molecular Physics- Theroretical Principles and Experimental Methods*, M.A. Estes, A.C.F. Ribeiro, A.K. Haghi (Eds.), Apple Academic Press, Inc./CRC, New Jersey, Chapter 16, 2021. ISBN: 9781003150053
31. Ribeiro, A. C. F., Verissimo, L. M. P., Valente, A. J. M., Cabral, A. M. T. D. P. V., Estes, M. A., *“Hydrodynamic Radii for Sodium Salts in Aqueous Solutions: Contribution from Electrical Conductance and Diffusion”* in *Optical and Molecular Physics Theoretical Principles and Experimental Methods*, M. A. Estes, A. C. F. Ribeiro, A.K. Haghi (Eds.), Apple Academic Press, Inc./CRC, New Jersey, Chapter 17, 2021. ISBN-9781003150053
32. Cova, T. F. G. G., Murtinho, D., Garcia, R., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M., *Cyclodextrin-based polymers for pollutant removal*, in: *Applications of biodegradable and biobased polymers for human health and a cleaner environment*, I. Stoica, O. Mukbaniani, N.K. Rawat, A.K. Haghi (Editors). Apple Academic Press, New York, 2021. Chapter 14. DOI: 10.1201/9781003146360-17 ISBN 978-1-77188-976-6.
33. Vilsinski, B. H., Gonçalves, R. S., Caetano, W., Souza, P. R., Oliveira, A. C., Gomes, Y. S., Gerola, A. P., Martins, A. F., Valente, A. J. M., Muniz, E. C., *Photodynamic Therapy: Use of Nanocarrier Systems to Improve Its Effectiveness*, in: *Functional Properties of Advanced Engineering Materials and Biomolecules. Engineering Materials*. F.A. La Porta, C.A. Taft (eds). Springer, Cham, 2021. DOI:10.1007/978-3-030-62226-8\_10
34. Palito, C., Encarnação, T., Singh, P., Valente, A. J. M., Pais, A. A. C. C., *Microalgae immobilization and use in bioremediation*, in: *Marine Microbial Bioremediation*. A. K. Vala, D. R. Dudhagara, B. P. Dave (Eds.). CRC Press, Boca Raton, 2021. DOI: 10.1201/9781003001072

35. Fangaia, S. I. G., Nicolau, P. M. G., Guerra, F. A. D. R. A., Lobo, V. M. M., Ribeiro, A. C. F., *Effect of Light on Transport of Potassium Thiocyanate in Aqueous Solutions: Part I* in *Applied Pharmaceutical Practice and Nutraceuticals Natural Product Development*, Mahapatra, D. K., Aguilar, C. N., Hagui, A. K., (Eds.), Apple Academic Press, Inc./CRC, New Jersey, Chapter 12, 2021.  
ISBN: 9781003054894
36. Estes, M. A., Ribeiro, A. C. F., Haghi, A. K., Eds., *Theoretical and Empirical Analysis in Physical Chemistry: A Framework for Research*, Innovations in Physical Chemistry Series, Apple Academic Press Inc., Florida, USA, 2021.  
ISBN: 978-1-77188-856-1
37. Estes, M. A., Ribeiro, A. C. F., Haghi, A. K., Eds., *Chemistry and Chemical Engineering for Sustainable Development: Best Practices and Research Directions*, Innovations in Physical Chemistry Series, Apple Academic Press Inc., Burlington, Canada, 2021.  
ISBN: 978-1-77188-870-7
38. Vitorino, C., Jorge, A., Pais, A., *Recent Trends in Nanotechnology for Brain Delivery: A Brief Outlook in Nanoparticles for Brain Drug Delivery*, Jenny Stanford Publishing, Chapter I, pp. 3-7, 2021  
ISBN: 9781003119326
39. Basso, J., Mendes, M., Ferreira, M., Sousa, J., Pais, A., Vitorino, C., *Recent in vitro Models for the Blood-Brain Barrier in Nanoparticles for Brain Drug Delivery*, Jenny Stanford Publishing, pp. 383-405, 2021  
ISBN: 9781003119326
40. Jorge, A. F., Grijalvo, S., Pais, A., Eritja, R., *Lipid Nanocarriers for Oligonucleotide Delivery to the Brain in Nanoparticles for Brain Drug Delivery*, Jenny Stanford Publishing, pp. 257-287, 2021  
ISBN: 9781003119326
41. Vitorino, C., Jorge, A., Pais, A., *Nanoparticles for Brain Drug Delivery*. Pan Stanford Publishing and CRC Press (Taylor & Francis), Singapore. Nanoparticles for Brain Drug Delivery  
1st Edition, New York, 2021  
ISBN: 9789814877312
42. Ferreira, M., Cova, T., Paixão, J., Pais, A., Vitorino, C., *Coprecipitation synthesis, stabilization and characterization of oleic acid-coated iron oxide nanoparticles, for magnetically oriented hybrid system vectorization*, in *Magnetic Nanoparticle-Based Hybrid Materials*, Chap.11, A. Ehrmann, et al., Editors, Woodhead Publishing. pp. 273-301, 2021  
ISBN: 9780128236895
43. Vitorino, C., Lopes, C. M., Lúcio, M., *Nanomedicine and drug delivery approaches*. In *Organelle and Molecular Targeting*, Chapter II: CRC Press, Taylor & Francis Group, Singapore. 2021  
ISBN: 1003092772, 9781003092773
44. Galdes, C. F. G. C., Delville, M.- H. *Iron Oxide Nanoparticles for Bio-Imaging*, em *Metal Ions in Bio-Imaging Techniques* (Eds. Sigel, A., Freisinger, E., Sigel, R K. O), Walter de Gruyter GmbH, Berlim (Alemanha), Vol. 22, Capítulo 9, pp. 271-297, 2021.  
Print ISBN: 978-3-110-68556-5. Ebook ISBN: 978-3-110-68570-1

45. Orvalho, T., Vaz, D. C., Ribeiro, V., Campos, M. J., *Storage Procedures Influence the Antioxidant Capacity of Bee Pollen*. In: da Costa Sanches Galvão J.R. et al. (eds). ICoWEFS 2021. Springer, Cham., 2021.

DOI: 10.1007/978-3-030-75315-3\_23

Print ISBN: 978-3-030-75314-6

Online ISBN: 978-3-030-75315-3

46. Parracho, T., Vaz, D. C., Veríssimo, P., Ribeiro, V., *Sand-Dune Plants from the Atlantic Coast of the Iberian Peninsula: Features and Applications*. In: da Costa Sanches Galvão J.R. et al. (eds) ICoWEFS 2021. Springer, Cham., 2021.

DOI: 10.1007/978-3-030-75315-3\_15

Print ISBN: 978-3-030-75314-6

Online ISBN: 978-3-030-75315-3

47. Preto, A. J., Marques-Pereira, C., Baptista, S. J., Bueschbell, B., Barreto, C. A. V., Gaspar, A. T., Pinheiro, I., Pereira, N., Pires, M., Ramalhão, D., Silvério, D., Rosário-Ferreira, N., Melo, R., Mourão, J., Moreira, I. S., *Targeting GPCRs via Multi-platforms arrays and AI*, in *Reference Module in Biomedical Sciences*. Elsevier, 2021.

DOI: 10.1016/B978-0-12-820472-6.00048-7

ISBN: 978-0-12-801238-3

48. Rosário-Ferreira, N., Marques-Pereira, C., Gouveia, R. P., Mourão, J., Moreira, I. S., *Guardians of the cell: State-of-the-art of membrane proteins from a computational point-of-view*, in *Computational Design of Membrane Proteins*, Methods in Molecular Biology, Moreira, I. S., Machuqueiro, M., and Mourão, J., Ed., Vol 2315, Humana, New York, NY, pp. 3-28, 2021.

DOI: 10.1007/978-1-0716-1468-6\_1

ISBN: 978-1-0716-1468-6

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

1. Viegas, L. P., Nunes, C. M., Fausto, R., *Spin-Forbidden Heavy-Atom Tunneling in the Ring-Closure of Triplet Cyclopentane-1,3-diyl*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 23, pp 5797-5803, 2021. "HOT Article", in the thematic collection "2021 PCCP HOT Articles".

DOI: 10.1039/D1CP00076D

2. Sıdır, İ., Góbi, S., Sıdır, Y. G., Fausto, R., *Infrared Spectrum and UV-Induced Photochemistry of Matrix-Isolated Phenyl 1-Hydroxy-2-Naphthoate*, *Photochem*, 1 pp 10-25, 2021.

DOI: 10.3390/photochem1010002

3. Nogueira, B. A., Milani, A., Castiglioni, C., Fausto, R., *The Correlation between Experimental Polarized Raman Spectra and Their DFT Prediction in the LCAO Framework: the R3c LiNbO<sub>3</sub> Crystal as a Test Case*, *J. Raman Spectrosc.*, 52, pp 995-1010, 2021.

DOI: 10.1002/jrs.6091

4. Issaoui, F., Issaoui, H., Dhahri, E., Costa, B. F. O., Nogueira, B. A., Fausto, R., *Specific Features of Structural, Magnetic, Raman and Mössbauer Properties of La<sub>0.57</sub>Nd<sub>0.10</sub>Sr<sub>0.18</sub>Ag<sub>0.15</sub>FeO<sub>3</sub> Ferrite Nanoparticules*, *J. Mol. Struct.*, 1238, Art. 130344, 2021.

DOI: 10.1016/j.molstruc.2021.130344

5. Sıdır, İ., Sıdır, Y. G., Góbi, S., Berber, H., Fausto, R., *Structural Relevance of Intramolecular H-bonding in Ortho-hydroxyaryl Schiff Bases: The Case of 3-(5-Bromo-2-hydroxybenzylidene-amino)phenol*, *Molecules*, 26, Art. 2814, 2021.

DOI: 10.3390/molecules26092814

6. Roque, J. P. L., Nunes, C. M., Viegas, L. P., Pereira, N. A. M., Pinho e Melo, T. M. D. V., Schreiner, P. R., Fausto, R., *Switching on H-tunneling Through Conformation Control*, *J. Amer. Chem. Soc.*, 143, pp. 8266-8271, 2021.

DOI: 10.1021/jacs.1c04329

Featured in "Spotlights on Recent JACS Publications". DOI: 10.1021/jacs.1c05898

7. Nunes, C. M., Pereira, N. A. M., Reva, I., Fausto, R., *Evidence of IR-Induced Chemistry in Neat Solid: Tautomerization of Thiotropolone by Thermal, Electronic and Vibrational Excitations*, *J. Phys. Chem. A*, 125, pp 6394-6403, 2021.

DOI: 10.1021/acs.jpca.1c04081

8. İldiz, G. O., Karadağ, A., Kaygisiz, E., Fausto, R., *PLS-DA Model for the Evaluation of Attention Deficit and Hyperactivity Disorder in Children and Adolescents through Blood Serum FTIR Spectra*, *Molecules*, 26, Art. 3400, 2021.

DOI: 10.3390/molecules26113400

9. Secrieru, A., Lopes, S., Cristiano, M. L. S., Fausto, R., *Structure and IR Spectra of 3(5)-Aminopyrazoles and UV-Induced Tautomerization in Argon Matrix*, *Molecules*, 26, Art. 4299, 2021.

DOI: 10.3390/molecules26144299

10. Golbedaghi, R., Justino, L. L. G., Oshal, F., Jamehbozorgi, S., Abdolmalekie, M., Fausto, R., *A New Schiff Base Ligand as a Fluorescence Probe for Cu(II) Detection in Semi-aqueous Solution: Synthesis, Characterization, Fluorescence and Mechanistic Insight*, *Inorg. Chim. Acta.*, 528, Art. 120623, 2021.

DOI: 10.1016/j.ica.2021.120623

11. Nunes, C. M., Pereira, N. A. M., Viegas, L. P., Pinho e Melo, T. M. V. D., Fausto, R., *Inducing Bond-Breaking/Bond-Forming Reactions by Infrared Vibrational Excitation of a Remote Antenna*, *Chem. Comm.*, 57, pp 9570-9573, 2021.

DOI: 10.1039/D1CC03574F

12. İldiz, G. O., Tabanez, A. M., Nunes, A., Roque, J. P. L., Justino, L. L. G., Ramos, M. L., Fausto, R., *Molecular Structure, Spectroscopy and Photochemistry of Alprazolam*, *J. Mol. Struct.*, 1247, Art. 131295, 2022.

DOI: 10.1016/j.molstruc.2021.131295

13. Lopes Jesus, A. J., Fausto, R., Reva, I., *Conformational Structure, IR-Induced, and UV-Induced Transformations of Carvacrol Isolated in a Low Temperature Ar Matrix*, *J. Phys. Chem. A*, 125, pp 8215-8229, 2021.

DOI: 10.1021/acs.jpca.1c05907

14. Chambel, A., Sanati, A. L., Lopes, P. A., Nikitin, T., Fausto, R., de Almeida, A. T., Tavakoli, M., *Laser Writing of Eutectic Gallium–Indium Alloy Graphene-Oxide Electrodes and Semitransparent Conductors*, *Adv. Mater. Technol.*, 2021.

DOI: 10.1002/admt.202101238

15. Nogueira, B. A., Lopes, S. M. M., Lopes, S., Nikitin, T., Rodrigues, A. C. B., Eusébio, M. E. S., Paixão, J. A., Pinho e Melo, T. M. V. D., Milani, A., Castiglioni, C., Fausto, R., *2,4,6-Trinitro-N-(m-tolyl)aniline: A New Polymorphic Material Exhibiting Different Colors*, *Cryst. Growth Des.*, 21, pp 7269-7284, 2021.

DOI: 10.1021/acs.cgd.1c01123

16. Rozenberg, M., Fausto, R., Reva, I., *Variable Temperature FTIR Spectra of Polycrystalline Purine Nucleobases and Estimating Strengths of Individual Hydrogen Bonds*, *Spectrochim. Acta A*, 251, Art. 119323, 2021.

DOI: 10.1016/j.saa.2020.119323

17. Maksimova, A. A., Petrova, E. V., Chukin, A. V., Nogueira, B. A., Fausto, R., Szabó, Á., Dankházi, Z., Felner, I., Gritsevich, M., Kohout, T., Kuzmann, E., Homonnay, Z., Oshtrakh, M. I., *Bjurböle L/LL4 Ordinary Chondrite Properties Studied by Raman Spectroscopy, X-Ray Diffractions, Magnetization Measurements and Mössbauer Spectroscopy*, *Spectrochim. Acta A*, 248, Art. 119196, 2021.

DOI: 10.1016/j.saa.2020.119196

18. Lopes Jesus, A. J., Reva, I., Nunes, C. M., Roque, J. P. L., Fausto, R., *UV-induced Photochemistry of Benzoxazole, 2-Isocyanophenol and 2-Cyanophenol Isolated in Low-temperature Ar Matrixes*, *J. Org. Chem.*, 85, pp 6126-6137, 2021.

DOI: 10.1021/acs.joc.0c02970

19. Nogueira, B. A., Silva, A. D., Mendes, M. I. P., Pontinha, A. D. R., Serpa, C., Calvete, M. J. F. Rocha-Gonçalves, A., Caridade P. J. B. S, Rodrigues, S. P. J., *Molecular School – a pre-university chemistry school*, *Chem. Teach. Int.*, 3 pp 257-268, 2021.

DOI: 10.1515/cti-2020-0013

20. Brás, E. M., Fischer, T. L., Suhm, M. A., *The Hydrates of TEMPO: Water Vibrations Reveal Radical Microsolvation*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 60, Art. 19013, 2021.

DOI: 10.1002/anie.202104496.

21. Tozri, A., Alhalafi D. S., Alrowaili, Z. A., Horchani, M., Omri, A., Skini, R. S., Ghorai, A., Benali, A., Costa, B., Ildiz, G. O., *Investigation of the Magnetocaloric Effect and the Critical Behavior of the Interacting Superparamagnetic Nanoparticles of  $La_{0.8}Sr_{0.15}Na_{0.05}MnO_3$* , *J. Alloys & Comp.*, 890, Art. 161739, 2021.

DOI: 10.1016/j.jallcom.2021.161739

22. Ildiz, G. O., Fausto, R., *Conformational Analysis, Spectroscopy and Photochemistry of Matrix-Isolated 1H- and 2H- Tautomeric Forms of Ethyl Tetrazole-5-Carboxylate*, *J. Photochem. Photobiol. A: Chemistry*, 404, Art. 112899, 2021.

DOI: 10.1016/j.jphotochem.2020.112899



23. Golbedaghi, R., Ildiz, G. O., Azadbakht, R., Fausto, R., *A New Tetramine Bis(2-naphthol)-derivative Fluorescent Chemosensor for Aluminum Ion (Al<sup>3+</sup>)*, *J. Mol. Struct.*, 1250, Art. 131775, 2021.

DOI: 10.1016/j.molstruc.2021.131775

24. Sıdır, I., Sıdır, Y. G., Góbi, S., Berber, H., Ildiz, G. O., Fausto, R., *UV-induced -OCH<sub>3</sub> Rotamerization in a Matrix-isolated Methoxy-substituted Ortho-hydroxyaryl Schiff Base*, *Photochem. Photobiol. Sci.*, in the press

DOI: 10.1007/s43630-021-00166-z

25. Baptista, J. A., Castro, R. A. E., Rosado, M. T. S., Maria, T. M. R., Silva, M. R., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., *Polymorphic Cocrystals of the Antimalarial Drug Pyrimethamine: Two Case Studies*, *Cryst. Growth Des.*, 21, 3699-3713, 2021.

DOI: 10.1021/acs.cgd.1c00005

26. Baptista, J. A., Rosado, M. T. S., Castro, R. A. E., Évora, A. O. L., Maria, T. M. R., Silva, M. R., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., *Dihydrofolate Reductase Inhibitors: The Pharmacophore as a Guide for Co-Crystal Screening*, *Molecules*, 26, 6721, 2021.

DOI: 10.3390/molecules26216721

27. Silva, J. F. C., Rosado, M. T. S., Eusébio, M. E. S., *Structure and energetics of intermolecular association in two lurasidone co-amorphous drug systems*, *J. Mol. Struct.*, 1242, 15 October 2021, 130709, 2021.

DOI: 10.1016/j.molstruc.2021.130709

28. Pinto, M., Eusébio, E., Monteiro, C., *Development and Validation of an Analytical Method for Volatiles with Endogenous Production in Putrefaction and Submersion Situations*, *J Anal Toxicol*, 945, 961-968, 2021.

DOI: 10.1093/jat/bkaa154

29. Cardoso, M. A., Correia, S. F. H., Gonçalves, H. M. R., Pereira, R. F. P., Pereira, S., Maria, T. M. R., Silva, M. M., Valente, A. J. M., Fortunato, E., Ferreira, R. A. S., Bermudez, V. Z., *Solar spectral management with electrochromic devices including PMMA films doped with biluminescent ionosilicas*, *J. Sol-Gel Sci. Technol.*, 101, pp 58-70, 2021.

DOI.org/10.1007/s10971-021-05612-z

30. Rodrigues, F. M. S., Dias, L. D., Calvete, M. J. F., Maria, T. M. R., Rossi, L. M., Pombeiro, A. J. L., Martins, L. M. D. R. S., Pereira, M. M., *Immobilization of Rh(I)-N-Xantphos and Fe(II)-C-scorpionate onto magnetic nanoparticles: reusable catalytic system for sequential hydroformylation/acetalization*, *Catalysts*, 11, pp 608, 2021.

DOI.org/10.3390/catal11050608

31. Aroso, R. T., Piccirillo, G., Arnaut, Z. A., Gonzalez, A. C. S., Rodrigues, F. M. S., Pereira, M. M., *Photodynamic inactivation of influenza virus as a potential alternative for the control of respiratory tract infections*, *J. Photochem. Photobiol.*, 7, pp 100043, 2021.

DOI: 10.1016/j.jpap.2021.100043.

32. Aroso, Rafael T., Schaberle, F.A., Arnaut, L. G., Pereira, M. M., "Photodynamic disinfection and its role in controlling infectious diseases". *Photochemical & Photobiological Sciences* 20 11 (2021): 1497-1545.  
DOI: 10.1016/j.jpap.2021.100043.
33. Aroso, R. T., Guedes, R. C., Pereira, M. M., *Synthesis of Computationally Designed 2,5(6)-Benzimidazole Derivatives Via Pd-Catalyzed Reactions for Potential E. coli DNA Gyrase B Inhibition*, *Molecules* 26 (2021), 1326.  
DOI: 10.3390/molecules26051326
34. Câmara, V. S., Chaves, O. A., de Araújo, B. B., Gonçalves, P. F. B., Iglesias, B. A., Ceschi, M. A., Rodembusch, F. S., "Photoactive homomolecular bis(n)-lophine dyads: Multicomponent synthesis, photophysical properties, theoretical investigation, docking and interaction studies with biomacromolecules". *J. Mol. Liq.* 2021, 118084.  
DOI: 10.1016/j.molliq.2021.118084
35. Ferreira, C., Duarte, S. C., Costa, E., Pereira, A. M. P. T., Silva, L. J. G., Almeida, A., Lino, C., Pena, A., "Urine biomonitoring of glyphosate in children: exposure and risk assessment". *Environmental Research* (2021):  
DOI: 10.1016/j.envres.2021.111294.
36. Gierlich, P., Mucha S. G., Robbins E., Gomes-da-Silva, L. C., Matczyszyn, K., Senge, M. O., *One-photon and two-photon photophysical properties of tetrafunctionalized Temoporfin (m-THPC) derivatives as potential agents for two-photon induced photodynamic therapy*. *ChemPhotoChem*, Dec 2021.  
DOI:10.1002/cptc.202100249
37. Gonzalez, A. C. S., Aroso, R. T., Carrilho, R. M. B., Claver, C., Masdeu-Bultó, A. M., Pereira, M. M., *Sustainable Synthesis of Polymeric Materials versus Fine Chemicals via CO<sub>2</sub> Addition to Epoxides*, *Chem. Proc.*, 3, pp 17, 2021.  
DOI: 10.3390/ecsoc-24-08357.
38. Gonzalez, A. C. S., Felgueiras, A. P., Aroso, R. T., Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M., *Al(III) phthalocyanine catalysts for CO<sub>2</sub> addition to epoxides: Fine-tunable selectivity for cyclic carbonates versus polycarbonates*, *J. Organomet Chem.*, 950, pp 121979, 2021.  
DOI: 10.1016/j.jorganchem.2021.121979
39. Jesus, C. S. H., Soares, H. T., Piedade, A. P., Cortes, L., Serpa, C., *Using amyloid autofluorescence as a biomarker for lysozyme aggregation inhibition*, *Analyst*, 146, pp 2383-2391, 2021.  
DOI: 10.1039/D0AN02260H
40. Karlsson, J. K. G., Atahan, A., Harriman, A., Tkachenko, N., Ward, A. D., Schaberle, F. A., Serpa, C., Arnaut, L. G., *Singlet Exciton Fission, and Associated Enthalpy Changes, with a Covalently-Linked Bichromophore Comprising TIPS-Pentacenes held in an Open Conformation*, *J. Phys. Chem. A*, 125, pp 1184-1197, 2021.  
DOI: 10.1021/acs.jpca.0c09961

41. Lobo, A. C. S., Tomé, V. A., Schaberle, F. A., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., Serpa, C., Arnaut, L. G., *Biocompatible Ring-deformed Indium Phthalocyanine Label for Near-infrared Photoacoustic Imaging*, *Inorg. Chim. Acta*, 514, pp 119993, 2021.

DOI: 10.1016/j.ica.2020.119993

42. Maldonado-Carmona, N., Ouk, T.-S., Villandier, N., Calliste, C. A., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., Leroy-Lhez, S., *Photophysical and antibacterial properties of porphyrins encapsulated inside acetylated lignin nanoparticles*, *Antibiotics*, 10, pp 513, 2021.

DOI: 10.3390/antibiotics10050513

43. Nepovimova, E., Svobodova, L., Doležal, R., Hepnarova, V., Junova, L., Jun, D., Korabecny, J., Kucera, T., Gazova, Z., Motykova, K., Kubackova, J., Bednarikova, Z., Janockova, J., Jesus, C. S. H., Cortes, L., Pina, J., Rostohar, D., Serpa, C., Soukup, O., Aitken, L., Hughes, R. E., Musilek, K., Muckova, L., Jost, P., Chvojkova, M., Vales, K., Valis, M., Chrienova, Z., Chalupova, K., Kuca, K., *Tacrine–Benzothiazoles: Novel Class of Multitarget anti-Alzheimer’s Drugs Dealing with Cholinergic, Amyloid and Mitochondrial Systems*, *Bioorg. Chem.*, 107 pp 104596, 2021.

DOI: 10.1016/j.bioorg.2020.104596

44. Pereira, D. A., Silva, A. D., Martins, P. A. T., Piedade, A. P., Martynowych, D., Veysset, D., Moreno, M. J., Serpa, C., Nelsen, K. A., Arnaut, L. G., *Imaging of photoacoustic-mediated permeabilization of giant unilamellar vesicles (GUVs)*, *Sci. Rep.*, 11, 2775, 2021.

DOI: 10.1038/s41598-021-82140-4

45. Piccirillo, G., Moreira-Santos, M., Válega, M., Eusébio, M. E. S., Silva, A. M. S., Ribeiro, R., Freitas, H., Pereira, M. M., Calvete, M. J. F., *Supported metalloporphyrins as reusable catalysts for the degradation of antibiotics: synthesis, characterization, activity and ecotoxicity studies*, *Appl. Catal. B: Environ.*, 282, pp 119556, 2021

DOI: 10.1016/j.apcatb.2020.119556

46. Piccirillo, G., Aroso, R. T., Rodrigues, F. M. S., Carrilho, R. M. B., Pinto, S. M. A., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., *Oxidative Degradation of Pharmaceuticals: the Role of Tetrapyrrole-based Catalysts*, *Catalysts*, 11, pp 1335, 2021.

DOI: 10.3390/catal11111335

47. Pinto, S. M. A., Almeida, S. F. F., Tomé V. A., Prata, A. D., Calvete, M. J. F., Serpa, C., Pereira, M. M., *Water Soluble Near Infrared Dyes Based on PEGylated-Tetrapyrrolic Macrocycles*, *Dyes and Pigments*, 195, 109677, 2021.

DOI: 10.1016/j.dyepig.2021.109677

48. Rodrigues, F. M. S., Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M., *Reusable catalysts for hydroformylation based reactions*, *Eur. J. Inorg Chem.*, pp 2294, 2021.

DOI: 10.1002/ejic.202100032

49. Rodrigues, F. M. S., Dias, L. D., Calvete, M. J. F., Martins, L. M. D. R. S., Maria, T. M. R., Eusébio, M. E. S., Rossi, L. M., Pombeiro, A. J. L., Pereira, M. M., *Immobilization of Rh(I)-N-Xantphos and Fe(II)-C-Scorpionate onto Magnetic Nanoparticles: Reusable Catalytic System for Sequential Hydroformylation/Acetalization*, *Catalysts*, 11, pp 608, 2021.

DOI: 10.3390/catal11050608

50. Pansini, F. N. N., Mota, V. C., Varandas, A. J. C., *Optimized Structural Data at the Complete Basis Set Limit via Successive Quadratic Minimizations*. Journal of Physical Chemistry 125 (50), pp. 10657-10666.  
DOI: 10.1021/acs.jpca.1c07596
51. Mota, V. C., Varandas, A. J. C., Mendoza, E., Wakelam, V., Galvao, B. R. L., *SiS Formation in the Interstellar Medium through Si plus SH Gas-phase Reactions*. Astrophysical Journal 920(1).  
DOI: 10.3847/1538-4357/ac18c5
52. Varandas, A. J. C. *Canonical and explicitly-correlated coupled cluster correlation energies of sub-kJ mol<sup>-1</sup> accuracy via cost-effective hybrid-post-CBS extrapolation*. Physical Chemistry Chemical Physics 23 (15), pp.9571-9584.  
DOI: 10.1039/d1cp00357g
53. Varandas, A. J. C. *Post-complete-basis-set extrapolation of conventional and explicitly correlated coupled-cluster energies: can the convergence to the CBS limit be diagnosed?* Physical Chemistry Chemical Physics 23 (14), pp.8717-8730  
DOI: 10.1039/d1cp00538c
54. Xavier, F. G. D., Varandas, A. J. C., *Modelling adiabatic cusps in HO<sub>2</sub><sup>+</sup> via 2 x 2 diabatic matrix*. Molecular Physics 119 (10).  
DOI: 10.1080/00268976.2021.1904157
55. Alves, M. O., Goncalves, C. E. M., Braga, J. P., Mota, V. C., Varandas, A. J. C., Galvao, B. R. L., *Accurate DMBE potential-energy surface for CNO((2)A<sup>+</sup>) and rate coefficients in C(P-3)+NO collisions*. Journal of Chemical Physics 154 (3).  
DOI: 10.1063/5.0031199
56. Rocha, C. M. R., Varandas, A. J. C., *A general code for fitting global potential energy surfaces via CHIPR method: Direct-Fit Diatomic and tetratomic molecules*. Computer Physics Communications 258.  
DOI: 10.1016/j.cpc.2020.107556
57. Yue, Xian-Fang., Fang, Jianjun., Li, Jing., Feng, Hai-Ran., Jiao, Ming-Chun., Caridade, Pedro J. S. B., Varandas, A. J. C., *A further look at the Li plus HCl -> LiCl plus H reaction*. Chemical Physics Letters, 780.  
DOI: 0.1016/j.cplett.2021.138924
58. Duque-Prata, A., Serpa, C., Caridade, Pedro J. S. B., *Photochemistry of 1-Phenyl-4-Allyl-Tetrazol-5-One: A Theoretical Study Contribution towards Mechanism Elucidation*. Applied Sciences-Basel, 11 (9).  
DOI: 10.3390/app11094045
59. Gaudêncio, J., Rodrigues, S. P. J., Martins, D., Foggatto Silveira, R. M. C., *Conhecimento tradicional Kaingang: o uso de ervas medicinais*. ODEERE 6(2), 35-53.  
DOI: 10.22481/odeere.v6i2.9793

60. Vilarim, P. R., Martins, D., Rodrigues, S. P. J., Etnoconhecimento Terena na literatura científica: um estudo bibliográfico para o Estado da Arte. *ODEERE* 6(2), 16-34.  
DOI: 10.22481/odeere.v6i2.9768
61. Vilarim, P. R., Martins, D., Rodrigues, S. P. J., A diferença da educação escolar indígena na colonização portuguesa de Angola e Brasil. *ODEERE* 6(2), 237-254.  
DOI: 10.22481/odeere.v6i2.9766
62. Bártolo, I., Santos, B. S., Fontinha, D., Machado, M., Francisco, D., Sepodes, B., Rocha, J., Mota-Filipe, H., Pinto, R., Figueira, M. E., Barroso, H., Nascimento, T., Matos, A. P. A., Alves, A. J. S., Alves, N. G., Simões C. J. V., Prudêncio, M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Taveira, N. *Novel Spiro- $\beta$ -Lactam BSS-730A Displays Potent Anti-HIV and Anti-Plasmodial Activity*, *ACS Infectious Diseases*, 7, pp 421-434, 2021.  
DOI: 10.1021/acsinfecdis.0c00768
63. Lopes, S. M. M., Santos, J. R. C., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Reactivity of Steroidal 1-Azadienes Toward Enamines: An Approach to Novel Chiral Penta- and Hexacyclic Steroids*, *Org. Biomol. Chem.*, 19, pp 1122-1132, 2021.  
DOI: 10.1039/D0OB02344B  
[featured on **The ISHC Bulletin**, *Recent Publications of ISHC Members*, Issue 53; March 2021].
64. Ramos, H., Soares, M. I., Silva, J., Raimundo, L., Gomes, C., Reis, F., Monteiro, F., Nunes, C., Reis, S., Bosco, B., Piazza, S., Domingues, L., Chlapek, P., Veselska, R., Inga, A., Pinho e Melo, T. M. V. D., Saraiva, L., *A New Selective P53 Activator and Anticancer Agent to Improve Colorectal Cancer Therapy*, *Cell Reports*, 35, 108982, 2021.  
DOI: 10.1016/j.celrep.2021.108982
65. Pereira, N. A. M., Laranjo, M., Nascimento, B. F. O., Simões, J. C. S., Pina, J., Costa, B. D. P., Brites, G., Braz, J., Seixas de Melo, J. S., Piñeiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Novel Fluorinated Ring-fused Chlorins as Promising PDT Agents Against Melanoma and Esophagus Cancer*, *RSC Med. Chem.*, 12, pp 615-627, 2021.  
DOI: 10.1039/d0md00433b
66. Alves, N. G., Bártolo, I., Alves, A. J. S., Fontinha, D., Francisco, D., Lopes, S. M. M., Soares, M. I. L., Simões, C. J. V., Prudêncio, M., Taveira, N., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Synthesis and Structure-Activity Relationships of New Chiral Spiro- $\beta$ -lactams Highly Active Against HIV-1 and Plasmodium*, *Eur. J. Med. Chem.*, 219, 113439, 2021.  
DOI: 10.1016/j.ejmech.2021.113439
67. Cardoso, A. L., Lopes, S. M. M., Grosso, C., Pineiro, M., Lemos, A., Pinho e Melo, T. M. V. D., *One-pot Synthetic Approach to Dipyrromethanes and Bis(indolyl)methanes via Nitrosoalkene Chemistry*, *J. Chem. Educ.*, 98, pp 2661-2666, 2021.  
DOI: 10.1021/acs.jchemed.1c00184
68. Soares, M. I. L., Gomes, C. S. B., Oliveira, M. C., Marçalo, J., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Synthesis of 5H-Chromeno[3,4-b]pyridines via DABCO-Catalyzed [3+3] Annulation of 3-Nitro-2H-Chromenes and Allenates*, *Org. Biomol. Chem.*, 19, pp 9711-9722, 2021.  
DOI: 10.1039/d1ob01130h

69. Alves, N. G., Alves, A. J. S., Soares, M. I. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Recent Advances in the Synthesis of Spiro- $\beta$ -Lactams and Spiro- $\delta$ -Lactams*, *Adv. Synth. Catal.*, 363, pp 2464-2501, 2021.  
DOI: 10.1002/adsc.202100013.
70. Alves, A. J. S., Alves, N. G., Soares, M. I. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Strategies and Methodologies for the Construction of Spiro- $\gamma$ -lactams: an Update*, *Org. Chem. Front.*, 8, pp 3543-3593, 2021.  
DOI: 10.1039/D0QO01564D.
71. Rénio, M. R. R., Sousa, F. J. P. M., Tavares, N. C. T., Valente, A. J. M., Serra, M. E. S., Murtinho, D., *(3S,4S)-N-Substituted-3,4-dihydropyrrolidines as Ligands for the Enantioselective Henry Reaction*. *Appl Organomet. Chem.*, e6175, 2021.  
DOI: 10.1002/aoc.6175
72. Machado T. F., Serra, M. E. S., Murtinho, D., Valente, A. J. M., Naushad, M., *Covalent Organic Frameworks: Synthesis, Properties and Applications—An Overview*, *Polymers*, 13(6), 970, 2021.  
DOI: 10.3390/polym13060970
73. Ribeiro, J. L. P., Alves, C., Cardoso, A. L., Lopes, S. M. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Reduction of Oximes and Hydrazones: Asymmetric and Diastereoselective Approaches*, *Curr. Org. Chem.*, 25, pp 2175-2198, 2021.  
DOI: 10.2174/1385272825666210706151631
74. Brandão, P., Marques, C., Burke, A., Pineiro, M., *The Application of Isatin-based Multicomponent-reactions in the Quest for New Bioactive and Druglike molecules*, *Eur. J. Med. Chem*, 211, 113102, 2021.  
DOI: 10.1016/j.ejmech.2020.113102
75. Brandão, P., Marques, C. S., Carreiro, E. P., Pineiro, M., Burke, A. J., *Engaging Isatins in Multicomponent reactions (MCRs) – Easy Access to Structural Diversity*, *Chem. Record*, 21, pp 1 – 115, 2021.  
DOI: 10.1002/tcr.202000167
76. Pineiro, M., Gomes, C., Peixoto, M., *Solvent-Free Mechanochemical Route to Chlorins Using in situ Generated Gas Reactant*, *Green Chem. Lett. Rev.*, 14, pp 338-343, 2021.  
DOI: 10.1080/17518253.2021.1921283
77. Brandão, P., Marques, C., Pinto, E., Pineiro, M., Burke A. J., *Petasis Adducts of Tryptanthrin – Synthesis, Biological Activity Evaluation and Druglikeness Assessment*, *New J. Chem.*, 45, pp 14633 – 14649, 2021.  
DOI: 10.1039/D1NJ02079J
78. Brandão, P., Puerta, A., Padrón, J. M., Kuznetsov, M. L., Burke, A. J., Pineiro, M., *Ugi Adducts of Isatin as Promising Antiproliferative Agents with Druglike Properties*, *Asian J. Org. Chem.*, 10, pp 3434-3455, 2021.  
DOI: 10.1002/ajoc.202100684

79. Gomes, C., Peixoto, M., Pineiro, M., *Modern Methods for the Sustainable Synthesis of Metalloporphyrins*, *Molecules*, 26, 6652, 2021.  
DOI: 10.3390/molecules26216652
80. Cardoso, M., Marto, C. M., Paula, A., Coelho, A. S., Pinho e Melo, T. M. V. D., Ferreira, M. M., Botelho, M. F., Carrilho, E., Laranjo, M., *Effectiveness of photodynamic therapy on treatment response and survival of patients with recurrent oral squamous cell carcinoma: a systematic review protocol*, *JBI Evidence Synthesis*, in press, 2021.  
DOI: 10.11124/JBIES-21-00014
81. Martín-Montes, A., Clares, M. P., Martín-Escolano, R., Delgado-Pinar, E., Marín, C., Verdejo, B., Á Martínez-Camarena, A., Molina-Carreño, D., García-España, E., Sánchez-Moreno, M., *Heterocyclic Diamines with Leishmanicidal Activity*, *ACS Infectious Diseases* 7, pp 3168-3181, 2021.  
DOI: 10.1021/acsinfecdis.1c00215
82. Savastano, M., Passaponti, M., Giurlani, W., Lari, L., Calisi, N., Delgado-Pinar, E., Salvador Serrano, E., García-España, E., Innocenti, M., Lazarov, V.K., Bianchi, A., *Linear, tripodal, macrocyclic: Ligand geometry and ORR activity of supported Pd(II) complexes*, *Inorganica Chimica Acta*, Vol. 518, pp 120250, 2021.  
DOI: 10.1016/j.ica.2021.120250.
83. Pinheiro, D., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *Tryptanthrin derivatives as efficient singlet oxygen sensitizers*, *Photochem, Photobiol. Sci.*, 00117-8, 2021.  
DOI: 10.1007/s43630-021-00117-8
84. Pinheiro, D., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *Sulfonated Tryptanthrin Analyte Increases Performance in pH Neutral Aqueous Redox Flow Batteries*, *Comm. Chem.*, 4, pp 89, 2021.  
DOI: 10.1038/s42004-021-00523-0
85. Pinheiro, D., Galvão, A. M., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *Red-Purple Photochromic Indigos from Green Chemistry: Mono-tBOC or Di-tBOC N-Substituted Indigos Displaying Excited State Proton Transfer or Photoisomerization*, *J. Phys. Chem. B.*, 125, 16, pp 4108-4119, 2021.  
DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c00120
86. Pinheiro, D., Pineiro, M., Galvão A. M., Seixas de Melo, J. S., *Deep in Blue with Green Chemistry: Influence of Solvent and Chain Length on the Behaviour of N- and N,N'- Alkyl Indigo Derivatives*, *Chem. Sci.*, 12, pp 303-313, 2021.  
DOI: 10.1039/D0SC04958A
87. Basso, J., Ramos, M. L., Pais, A., Vitorino, R., Fortuna, A., Vitorino, C., *Expediting Disulfiram Assays through a Systematic Analytical Quality by Design Approach*, *Chemosensors*, 9, pp 172, 2021.  
DOI: 10.3390/chemosensors9070172
88. Lima, A. R. F., Pereira, R. C., Azevedo J., Mendes A., Seixas de Melo, J.S., *On the path to aqueous organic redox flow batteries: Alizarin red S alkaline negolyte. Performance evaluation and photochemical studies*, *J. Mol. Liquids*, pp 336, 2021.  
DOI: 10.1016/j.molliq.2021.116364

89. Wetterling, D., Forster, M., Rodrigues, A. C. B., Seixas de Melo, J. S., Scherf, U., *Cationic Diazapentacenium Polymers made in a Sequence of C-N Cross Coupling Polymerization and Acid-mediated Post-polymerization Cyclization*, *Macromolecular Rapid Communications*, 42, pp 2100370, 2021.

DOI: 10.1002/marc.202100370

90. Rodrigues, A. C. B., Seixas de Melo, J. S., *Aggregation-Induced Emission: From Small Molecules to Polymers—Historical Background, Mechanisms and Photophysics*, *Topics in Current Chemistry*, 379:15, 2021.

DOI: 10.1007/s41061-021-00327-9

91. Seixas de Melo, J. S., Rodrigues, A. C. B., Scherf, U., Wetterling, D., *Tuning J-aggregate formation and emission efficiency in cationic diazapentacenium dyes*, *Chemistry - A European Journal*, 27, pp 7826–7830, 2021:

DOI: 10.1002/chem.202100123

92. Rodrigues, A. C. B., Eckert, A., Pina, J., Scherf, U., Seixas de Melo, J. S., *Polymeric near infrared emitters with bay-annulated indigo moieties*, *Materials Advances*, 2, pp 3736-3743, 2021.

DOI: 10.1039/D1MA00260K

93. Delgado-Pinar, E., Costa, A. L., Gonçalves, I. S., Pineiro, M., Pillinger, M., Seixas de Melo, J. S., *Tuning the Behavior of a Hydrotalcite-Supported Sulfonated Bithiophene from Aggregation-Caused Quenching to Efficient Monomer Luminescence*, *J. Phys. Chem. C*, 125, pp 8294–8303, 2021.

DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c00240

94. Pina, J., Dias, P., Serpa, C., Azevedo, J., Mendes, A., Seixas de Melo, J. S., *Phenomenological Understanding of Hematite Photoanode Performance*, *J. Phys. Chem. C*, 125, pp 8274–8284, 2021.

DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c11420

95. Amaral, R., Seixas de Melo, J. S., dos Santos, L. M. A., *Pigments from Eustigmatophyceae: an interesting class of microalgae for carotenoid production*, *Journal of Applied Phycology*, 33, pp 371-384, 2021.

DOI: 10.1007/s10811-020-02312-z

96. Sarrato, J., Pinto, A. L., Malta, G., Röck, E. G., Pina, J., Lima, J. C., Parola, A. J., Branco, P. S., *New 3-Ethynylaryl Coumarin-Based Dyes for DSSC Applications: Synthesis, Spectroscopic Properties, and Theoretical Calculations*, *Molecules*, 26, pp 2934, 2021.

DOI: 10.3390/molecules26102934

97. Gonçalves, R. C. R., Pina, J., Costa, S. P. G., Raposo, M. M. M., *Synthesis and characterization of aryl-substituted BODIPY dyes displaying distinct solvatochromic singlet oxygen photosensitization efficiencies*, *Dyes and Pigments*, 196, pp 109784, 2021.

DOI: 10.1016/j.dyepig.2021.109784

98. Pinto, A., Cunha, C., Aullón, G., Lima, J. C., Rodríguez, L., Seixas de Melo, J. S., *Comprehensive Investigation of the Photophysical Properties of Alkynylcoumarin Gold(I) Complexes*, *J. Phys. Chem. B*, 125, pp 11751-11760, 2021.

DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c07985.



99. Cunha, C., Klein, P., Rosenauer, C., Scherf, U., Seixas de Melo, J. S., *Fluorescence Studies on a Thermoresponsive PNIPAM-Polyfluorene Graft Copolymer*, *Macromolecules*, 54, pp 7612-7620, 2021.  
DOI: 10.1021/acs.macromol.1c00827.
100. Unruh, M. T., Scherf, U., Rodrigues, A. C. B., Cunha, C., Seixas de Melo, J. S., Schedlbauer, J., Lupton, J. M., *Unexpectedly flexible graphene nanoribbons with a polyacene ladder skeleton*, *J. Mater. Chem. C*, 9, pp 16208-16216, 2021.  
DOI: 10.1039/d1tc02302k
101. Ramos, M. L., Justino, L. L. G., Barata, R., Costa, T., Burrows H. D., *Complexes of In (iii) with 8-hydroxyquinoline-5-sulfonate in solution: structural studies and the effect of cationic surfactants on the photophysical behaviour*, *Dalton Trans.*, 50, pp 16970-16983, 2021.  
DOI: 10.1039/d1dt02858h
102. Mousa, S. A., Douglas, P., Burrows, H. D., Martincigh, B. S., *Singlet Oxygen Yield of an Amino-Acyl-Quinoxalinone Yellow Dye.*, *J. Fluoresc.*, 31, pp 1363–1369, 2021.  
DOI: 10.1007/s10895-021-02718-z
103. Encarnação, T., Santos, D., Ferreira, S., Valente, A. J. M., Pereira, J. C., Campos, M. G., Burrows, H. D., Pais, A. A. C. C., *Removal of imidacloprid from water by microalgae *Nannochloropsis* sp. and its determination by a validated RP-HPLC method*, *Bulletin of Environmental Contamination & Toxicology*, 107, pp 131–139, 2021.  
DOI: 10.1007/s00128-021-03228-1
104. Urcan, A., Criste, A., Dezmirean, D., Bobiș, O., Bonta, V., Dulf, F., Mărgăoan, R., Campos, M. G., *Bioavailability and bioactive compounds for natural knowledge of beebread as an important value-added food*. *LWT - Food Science and Technology*, 142, pp 111068, 2021.  
DOI: 10.1016/j.lwt.2021.111068
105. Filipe, H. A. L., Fiuza, S. M., Henriques, C. A., Antunes, F. E., *Antiviral and antibacterial activity of hand sanitizer and surface disinfectant formulations*, *Int. J. Pharm.*, 609, pp 121139, 2021.  
DOI:10.1016/j.ijpharm.2021.121139
106. Das, G., Shin, H-S., Tundis, R., Gonçalves, S., Tantengco, G., Campos, M. G., Acquaviva, R., Malfa, G., Romano, A., Robles, J., Clores, M., Patra, J., *Plant species of sub-family Valerianaceae: A review on its effect on the central nervous system*. *Plants*, 10, pp 846-874. 2021.  
DOI:10.3390/plants10050846
107. Pașca, C., Mărghitaș, L., Matei, I., Bonta, V., Mărgăoan, R., Copaciu, F., Bobiș, O., Campos, M. G., Dezmirean, D., *Screening of Some Romanian Raw Honeys and Their Probiotic Potential Evaluation*, *Appl. Sci.*, 11(13) pp 5816, 2021.  
DOI: 10.3390/app11135816
108. Campos, M. G., Frigerio, C., Bobiș, O., Urcan, A., Gomes N. G. M., *Infrared irradiation drying impact on bee pollen. Case study on *Eucalyptus* and *Salix* bee collected pollen composition*. *Processes*. 9, pp 890-912, 2021.  
DOI:10.3390/pr9050890

109. Iourouine, El M., Falcão S., Mustapha, H., Boujraf, S., Calhelha, R., Anjos, O., Campos, M. G., Vilas-Boas M., *Chemical, Cytotoxic, and Anti-Inflammatory Assessment of Honey Bee Venom from Apis mellifera intermissa. Antibiotics* 10, pp 1514- 1530, 2021.  
<https://doi.org/10.3390/antibiotics10121514>

110. Jesus, C. F., Alves, A. A. S., Fiuza, S. M., Murtinho, D., Antunes, F. E., *Mini-review: Synthetic methods for the production of cationic sugar-based surfactants J. Mol. Liquids*, 342, pp 117389,2021.  
DOI: 10.1016/j.molliq.2021.117389

111. Filipe, H. A.L., Almeida, M. C. F., Teixeira, R. R., Henriques, C. A., Antunes, F. E., *Dancing with oils - The interaction of lipases with different oil/water interfaces, Soft Matter*, 17 (30), pp 7086–7098, 2021.  
DOI: 10.1039/D1SM00590A

112. Simões, A. M., Venâncio, C., Alves, L., Antunes, F. E., Lopes, I., *Hydrophobic modifications of hydroxyethyl cellulose polymers: Their influence on the acute toxicity to aquatic biota J. Hazard. Materials*, 409, pp 124966, 409, 2021.  
DOI: 10.1016/j.jhazmat.2020.124966

113. Fernandes, C., Melro, E., Magalhães, S., Romano, A., Medronho, B., *New deep eutectic solvent assisted extraction of highly pure lignin from maritime pine sawdust (Pinus pinaster Ait.), Int. J. Biol. Macromol*, 177, pp. 294–305, 2021.  
DOI:10.1016/j.ijbiomac.2021.02.088

114. Melro, E., Valente, A. J. M., Antunes, F. E., Romano, A., Medronho B., *Enhancing lignin dissolution and extraction: The effect of surfactants, Polymers*, 714, pp 1-14, 2021.  
DOI: 10.3390/polym13050714

115. Melro, E., Antunes, F. E., da Silva, G. J., Carvalho, F., Alves, L., *Chitosan films in food applications. Tuning film properties by changing acidic dissolution conditions, Polymers*, 23(1), pp 1–12, 2021.  
DOI: 10.3390/polym13010001

116. Souza, P. R., Vilsinski, B. H., Nunes C. S., Bonkovoski, L. C., Garcia, F., Nakamura, C. V., Caetano, W., Valente, A. J. M., Martins, A. F., Muniz, E. C., *Application of a polyelectrolyte complex based on biocompatible polysaccharides for colorectal cancer inhibition, Carbohydr. Res.*, 499, pp 108194, 2021.  
DOI: 10.1016/j.carres.2020.108194

117. Vilsinski, B. H., Souza, P. R., Oliveira, A. C., Filho, C. M. C., Valente, A. J. M., Muniz, E. C., Borges, O., Gerola, A. P., Caetano, W., Martins, A. F., *Photophysics and drug delivery behavior of methylene blue into Arabic-gum based hydrogel matrices, Mater. Today Commun.*, 26, pp 101889, 2021.  
DOI: 10.1016/j.mtcomm.2020.101889

118. Rodrigo, M. M., Ribeiro, A. C. F., Moço, G., Cabral, A. M. T. D. P. V., Valente, A. J. M., Estes, M. A., Abreu, P. E., Santos, J. R. C., Marques, J. M. C., *Effect of sodium chloride on the behavior of the lactose in aqueous solution studied from diffusion experiments and molecular dynamics simulations*, *J. Chem. Thermodyn.*, 155, pp 106370, 2021.

DOI: 10.1016/j.jct.2020.106370

119. Correia, C. F. O., Marques, J. M. C., Bartolomei, M., Pirani, F., Maçôas, E., Martinho, J. M. G., *Aggregation of coronene: the effect of carboxyl and amine functional groups*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 23, pp 1500-1509, 2021.

DOI: 10.1039/DOCP05447J

120. Jesus, W. S., Prudente, F. V., Marques, J. M. C., Pereira, F. B., *Modeling microsolvation clusters with electronic-structure calculations guided by analytical potentials and predictive machine learning techniques*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 23, pp 1738-1749, 2021.

DOI: 10.1039/DOCP05200K

121. Andrade, M. D., Jesus, W. S., Prudente, F. V., Marques, J. M. C., *On the stabilization of the Li<sup>+</sup>-Li<sup>+</sup> interaction by microsolvation with rare-gas atoms*, *Theor. Chem. Acc.*, 140, pp 65, 2021.

DOI: 10.1007/s00214-021-02763-8

122. Santos, J. R. C., Abreu, P. E., Marques, J. M. C., *Calculation of diffusion coefficients of pesticides by employing molecular dynamics simulations*, *J. Mol. Liq.*, 340, pp 117106, 2021.

DOI: 10.1016/j.molliq.2021.117106

123. Maldonado, M., Sanabria, E., Velasquez-Silva, A., Casas-Hinestroza, J. L., Estes, M. A., *Comparative study of the volumetric properties of three regioisomers of diazoted C-tetra(propyl)resorcin[4]arene in DMSO at various temperatures*, *J. Mol. Liq.*, 325, pp 115252, 2021.

DOI: 10.1016/j.molliq.2020.115252

124. Sanabria, E., Cuenca, R. E., Estes, M. A., Maldonado, M., *Benzodiazepines: Their Use either as Essential Medicines or as Toxic Substances*. *Toxics* 9, pp 25, 2021.

DOI: 10.3390/toxics9020025

125. Cova, T. F., Murtinho, D., Aguado, R., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M., *Cyclodextrin polymers and cyclodextrin-containing polysaccharides for water remediation*, *Polysaccharides*, 2(1), pp 16-38, 2021.

DOI: 10.3390/polysaccharides2010002

126. Rénio, M. R. R., Sousa, F. J. P. M., Tavares, N. C. T., Valente, A. J. M., Serra, M. E. S., Murtinho, D., *(3S,4S)-N-substituted-3,4-dihydropyrrolidines as ligands for the enantioselective Henry reaction*, *Applied Organometallic Chemistry*, e6175, 2021.

DOI: 10.1002/aoc.6175

127. Vareda, J. P., Valente, A. J. M., Durães, L., *Ligands as copper and nickel ionophores: applications and implications on wastewater treatment*, *Advances in Colloid and Interface Science*, 289, pp 102364, 2021.

DOI: 10.1016/j.cis.2021.102364

128. Musilová, L., Mráček, A., Kašpárková, V., Minařík, A., Valente, A. J. M., Azevedo, E. F. G., Veríssimo, L. M. P., Rodrigo, M. M., Estesó, M. A., Ribeiro, A. C. F., *Effect of Hofmeister ions on transport properties of aqueous solutions of sodium hyaluronate*, *Int. J. Mol. Sciences*, 22(4), pp 1932, 2021.

DOI: 10.3390/ijms22041932

129. Galindres, D. M., Eslava, V. J., Ribeiro, A. C. F., Estesó, M. A., Vargas, E. F., Leaist, D. G., *Coupled mutual diffusion in aqueous (ammonium monovanadate + butyl-substituted sulfonated resorcinarene) solutions: An Experimental and theoretical approach*, *J. Chem. Thermodyn.*, 159, pp 106465, 2021.

DOI: 10.1016/j.jct.2021.106465

130. Cruz, Y. P., Estesó, M. A., Romero, C. M., *Effect of temperature on the partial molar volumes and the partial molar compressibilities of amino alcohols in aqueous solution*, *J. Chem. Thermodyn.*, 160, pp 106521, 2021.

DOI: 10.1016/j.jct.2021.106521

131. Utzeri, G., Verissimo, L., Murtinho, D., Pais, A. A. C. C., Perrin, F. X., Ziarelli, F., Iordache, T.-V., Sarbu, A., Valente, A. J. M., *Poly( $\beta$ -cyclodextrin)-activated carbon gel composites for removal of pesticides from water*, *Molecules*, 26, pp 1426, 2021.

DOI: 10.3390/molecules26051426

132. Vareda, J. P., García-González, C. A., Valente, A. J. M., Simón-Vázquez, R., Stipetic, M., Durães, L., *Insights on toxicity, safe handling and disposal of silica aerogels and amorphous nanoparticles*, *Environmental Science: Nano*, 8, pp 1177, 2021.

DOI: 10.1039/D1EN00026H

133. Rodrigo, M. M., Estesó, M. A., Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., Cabral, A. M. T. D. P. V., Verissimo, L. M. P., Musilova L., Mracek A., Leaist D. G., *Coupled mutual diffusion in aqueous paracetamol + sodium hydroxide solutions*, *J. Mol. Liquids*, 334, pp 116216, 2021.

DOI: 10.1016/j.molliq.2021.116216

134. Aguado, R., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Association of antioxidant monophenolic compounds with  $\beta$ -cyclodextrin-functionalized cellulose and starch substrates*, *Carbohydrate Polymers*, 267, pp 118189, 2021.

DOI: 10.1016/j.carbpol.2021.118189

135. Verissimo, L. M. P., Cabral, I., Cabral, A. M. T. D. P. V., Utzeri, G., Veiga, F. J. B., Valente, A. J. M., Ribeiro, A. C. F., *Transport properties of aqueous solutions of the oncologic drug 5-fluorouracil: a fundamental complement to therapeutics*, *J. Chem. Thermodyn.*, 161, pp 106533, 2021.

DOI: 10.1016/j.jct.2021.106533

136. Sharma, M., Aguado, R., Murtinho, D., Valente, A. J. M., Ferreira, P. J. T., *Novel approach on the synthesis of starch betainate by transesterification*, *International Journal of Biological Macromolecules*, 182, pp 1681-1689, 2021.

DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2021.05.175

137. Cesco, C. T., Valente, A. J. M., Paulino, A. T., *Methylene blue release from chitosan/pectin and chitosan/DNA blend hydrogels. Pharmaceutics*, 13, pp 842, 2021.  
DOI: 10.3390/pharmaceutics13060842
138. Ribeiro, A. C. F., Musilová, L., Mráček, A., Cabral, A. M. T. D. P. V., Santos, M. A., Cabral, I., Estesó, M. A., Valente, A. J. M., Leaist, D., *Host-guest paracetamol/cyclodextrin complex formation evaluated from coupled diffusion measurements, J. Chem. Thermodyn.*, 161, pp 106551, 2021.  
DOI: 10.1016/j.jct.2021.106551
139. Solís, A. C., Bento, D., Nunes, S., Valente, A., Pais, A., Vitorino, C. *Rethinking transdermal drug delivery using PVA-NLC based films, Polymer*, 230, pp 124032, 2021.  
DOI: 10.1016/j.polymer.2021.124032
140. Kumar, I. A., Viswanathan, N., Naushad, M., Valente, A. J. M., *Fabrication of lanthanum linked trimesic acid as porous metal organic frameworks for effective nitrate and phosphate adsorption from aqueous extract, J. Solid State Chem.*, 302, pp 122446, 2021.  
DOI: 10.1016/j.jssc.2021.122446
141. Cardoso, M. A., Correia, S. F. H., Gonçalves, H. M. R., Pereira, R. F. P., Pereira, S., Maria, T. M. R., Silva, M. M., Valente, A. J. M., Fortunato, E., Ferreira, R. A. S., Bermudez, V. Z., *Solar spectral management with electrochromic devices including PMMA films doped with biluminescent ionosilicas, Journal of Sol-Gel Science and Technology*, pp 259, 2021.  
DOI: 10.1007/s10971-021-05612-z
142. Musilová, L., Mráček, A., Azevedo, E. F. G., Rodrigo, M. M., Valente, A. J. M., Estesó, M. A., Ribeiro, A. C. F., *Dependence of Viscosity and Diffusion on b-Cyclodextrin and Chloroquine Diphosphate Interactions, Processes*, 9, pp 1433, 2021.  
DOI: 10.3390/pr9081433.
143. Sousa, J. F. M., Pina, J., Gomes, C., Dias, L. D., Pereira, M. M., Murtinho, D., Dias, P., Azevedo, J., Mendes, A., Seixas de Melo, J. S., Pais, A. A. C. C., Pineiro, M., Valente, A. J. M., *Transport and photophysical studies on porphyrin-containing sulfonated poly(etheretherketone) composite membranes, Mater. Today Commun.*, 29, pp 102781, 2021.  
DOI: 10.1016/j.mtcomm.2021.102781
144. Sharma, M., Aguado, R., Murtinho, D., Valente, A. J. M., Ferreira, P. J. T., *Synergetic effect of cationic starch (ether/ester) and Pluronic for improving inkjet printing quality of office papers, Cellulose*, 28, pp 10609-10624, 2021.  
DOI: 10.1007/s10570-021-04206-w
145. Guirado-Moreno, J. C., Guembe-Garcia, M., Garcia, J. M., Aguado, R., Valente, A. J. M., Vallejos, S., *Chromogenic anti-counterfeit and security papers: an easy and effective approach, ACS Applied Materials and Interfaces*, 13(50), pp 60454–60461, 2021.  
DOI: 10.1021/acsami.1c19228

146. Ravikumar, S., Pandiyan, V., Alam, M., Ahmad, N., Nithya, V., Krishnakumar, B., Sobral, A. J. F. N., *Costus speciosus* koen leaf extract assisted cs-znx ( X = O or S) nanomaterials: Synthesis, characterization and photocatalytic degradation of rr 120 dye under uv and direct sunlight, *J. Mol. Struct.*, 1225, pp 129176, 2021.

DOI: 10.1016/j.molstruc.2020.129176

147. Krishnakumar, B., Alsalme, A., Alharthi, F. A., Mani, D., Anandan, K., Amutha, P., Sobral, A. J. F. N., *Synthesis, characterization of gelatin assisted ZnO and its effective utilization of toxic azo dye degradation under direct sunlight*, *Opt. Mater.*, 113, pp 110854, 2021.

DOI: 10.1016/j.optmat.2021.110854

148. Aguiar, A., Farinhas, J., Silva, W., Santos, I. C., Alcácer, L., Brett, C. M. A., Morgado, J., Sobral, A. J. F. N., *New series of BODIPY dyes: Synthesis, characterization and applications in photovoltaic cells and light-emitting diodes*, *Dyes and Pigments*, 193, pp 109517, 2021.

DOI: 10.1016/j.dyepig.2021.109517

149. Fangaia, S. I. G., Nicolau, P. M. G., Guerra, F. A. D. R. A., Rodrigo, M. M., Utzeri, G., Cabral, A. M. T. D. P. V., Valente, A. J. M., Esteso, M. A., Ribeiro, A. C. F., *Effect of Cobalt and Chromium Ions on the Chlorhexidine Digluconate as Seen by Intermolecular Diffusion*, *Int. J. Mol. Sci.*, 22, pp 13266, 2021.

DOI: 10.3390/ijms222413266

150. Tavares, N. C. T., Cacho, V. R. G., Costa, D. C. S., Nunes, S. C. C., Pais, A. A. C. C., Murtinho, D., Serra, M. E. S., *Deciphering the mechanism behind efficient enantioselective ethylation with thiazolidine-based amino alcohols*, *Applied Organometallic Chemistry*, pp. e6567, 2021

DOI: 10.1002/aoc.6567

151. 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?*, *Journal of Voice*, 2021

DOI: 10.1016/j.jvoice.2021.02.006

152. Henriques, J., Schaberle, F. A., Serpa, C., Pais, A. A. C. C., Cardoso, C., Vitorino, C., *Photoacoustic method for real-time assessment of salt content in aqueous solutions*, *Talanta*, 222, pp.121497, 2021

DOI: 10.1016/j.talanta.2020.121497

153. Basso, J., Mendes, M., Silva, J., Cova, T., Luque-Michel, E., Jorge, A. F., Grijalvo, S., Gonçalves, L., Eritja, R., Blanco-Prieto, M. J., Almeida, A. J., Pais, A., Vitorino, C., *Sorting hidden patterns in nanoparticle performance for glioblastoma using machine learning algorithms*, *International Journal of Pharmaceutics*, 592, pp.120095, 2021

DOI: 10.1016/j.ijpharm.2020.120095

154. Vitorino, R., Guedes, S., Vitorino, C., Ferreira, R., Amado, F., Van Eyk, J. E., *Elucidating Citrullination by Mass Spectrometry and Its Role in Disease Pathogenesis* *Journal of Proteome Research*, 20, 1, 38–48, 2021

DOI: 10.1021/acs.jproteome.0c00474

155. Vieira, I., Sousa, J. J., Vitorino, C., *Paediatric Medicines - Regulatory Drivers, Restraints, Opportunities and Challenges*, *Journal of Pharmaceutical Sciences*, S0022-3549(21)00003-4, 2021.  
DOI: 10.1016/j.xphs.2020.12.036
156. Magalhães, S., Filipe, A., Melro, E., Fernandes, C., Vitorino, C., Alves, L., Romano, A., Rasteiro, M. G., Medronho, B., *Lignin extraction from waste pine sawdust using a biomass derived binary solvent system*, *Polymers*, 13(7), pp 1090, 2021  
DOI: 10.3390/polym13071090
157. Veloso, C., Cardoso, C., Vitorino, C., *Topical Fixed-Dose Combinations: A Way of Progress for Pain Management?*, *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 110(10), pp 3345-3361, 2021  
DOI: 10.1016/j.xphs.2021.06.009
158. Coelho, N., Filipe, A., Medronho, B., Magalhães, S., Vitorino, C., Alves, L., Gonçalves, S., Romano, A., *Rheological and Microstructural Features of Plant Culture Media Doped with Biopolymers: Influence on the Growth and Physiological Responses of In Vitro-Grown Shoots of Thymus lotocephalus*, *Polysaccharides*, 2(2), pp 538-553, 2021  
DOI: 10.3390/polysaccharides2020032
159. Trindade, F., Barros, A. S., Silva, J., Vlahou, A., Falcão-Pires, I., Guedes, S., Vitorino, C., Ferreira, R., Leite-Moreira, A., Amado, F., Vitorino, R., *Mining the Biomarker Potential of the Urine Peptidome: From Amino Acids Properties to Proteases*, *Int. J. Mol. Sci.*, 22, pp 5940, 2021  
DOI: 10.3390/ijms22115940
160. Silva, S., Bicker, J., Fonseca, C., Ferreira, R., Vitorino, C., Alves, G., Falcão, A., Fortuna, A., *Encapsulated Escitalopram and Paroxetine Intranasal Co-Administration: In Vitro/In Vivo Evaluation*, *Frontiers in Pharmacology*, 12, 2021  
DOI: <https://doi.org/10.3389/fphar.2021.751321>
161. Abreu, R. C., Ramos, C. V., Becher, C., Lino, M., Jesus, C., da Costa Martins, P. A., Martins, P. A. T., Moreno, M. J., Fernandes, H., Ferreira, L., *Exogenous loading of miRNAs into small extracellular vesicles*, *Journal of Extracellular Vesicles*, 10, pp e12111, 2021.  
DOI:10.1002/jev2.12111
162. Azevedo, A., Farinha, D., Geraldes, C. F. G. C., Faneca, H., *Combining gene therapy with other therapeutic strategies and imaging agents for cancer theranostics*, *Int. J. Pharmaceutics*, 606, 120905, 2021.  
DOI: 10.1016/j.ijpharm.2021.120905
163. Borges, P. H. O., Pedreiro, S. R., Baptista, S. J., Geraldes, C. F. G. C., Batista, M. T., Silva, M. M. C., Figueirinha, A. M. B. M. *Inhibition of  $\alpha$ -glucosidase by flavonoids of Cymbopogon citratus (DC) Stapf.*, *Journal of Ethnopharmacology*, 280, 114470, 2021.  
DOI: 10.1016/j.jep.2021.114470
164. Bornes, C., Fischer, M., Amelse, J. A., Geraldes, C. F. G. C., Rocha, J., Mafra, L., *What is being measured with P-bearing NMR probe molecules adsorbed on zeolites?* *J. Amer. Chem. Soc.*, 143, 13616–13623, 2021.  
DOI:10.1021/jacs.1c05014

165. Brito, C., Bertotti, T., Primitivo, M. J., Neves, M., Pires, C. L., Cruz, P. F., Martins, P. A. T., Rodrigues, A. C., Moreno, M. J., Brito, R. M. M., Campos, M. J., Vaz, D. C., Pessoa, M. F., Lidon, F., Reboredo, F., Ribeiro, V. S., *Corema album* spp: Edible wild crowberries with a high content in minerals and organic acids, *Food Chemistry*, 345, pp 128732, 2021.  
DOI:10.1016/j.foodchem.2020.128732
166. Carvalho, R. F. S., Pereira, G. A. L., Rocha, J., Castro, M. M. C. A., Granadeiro, C. M., Nogueira, Helena I. S., Peters, J. A., Geraldes, C. F. G. C., *Lanthanopolyoxometalates-silica core/shell nanoparticles as potential MRI contrast Agents*, *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2021, pp 3458–3465, 2021.  
DOI: 10.1002/ejic.202100445
167. Egas, A. P. V., Talavera-Prieto, N. M. C., Ferreira, A. G. M., Santos, J. B., Santos, M. J., Almeida, Z. L., Fonseca, I. M. A., *Speed of sound and derived thermodynamic properties of glycerol*, *The Journal of Chemical Thermodynamics*, 156, pp 106367, 2021.  
DOI: 10.1016/j.jct.2020.106367
168. Ferreira, A. G. M., Santos, J. B., Baptista, J., Khalighi, S., Brito, R. M. M., Cruz, P. F., *Effect of Isobutanol Addition on the Biodiesel Density*. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 66(12), pp 4542–4562, 2021.  
DOI: 10.1021/acs.jced.1c00588
169. Flora, S., Hipólito, N., Brooks, D., Marques, A., Morais, N., Silva, C. G., Silva, F., Ribeiro, J., Caceiro, R., Carreira, B. P., Burtin, C., Pimenta, S., Cruz, J., Oliveira, A., *Phenotyping Adopters of Mobile Applications Among Patients With COPD: A Cross-Sectional Study*, *Frontiers in Rehabilitation Sciences*, 2, pp. 72, 2021.  
DOI: 10.3389/fresc.2021.729237
170. Garda, Z., Kócs, T., Bányai, I., Martins, J. A., Kálmán, F. K., Tóth, I., Geraldes, C. F. G. C., Tircsó, G., *Complexes of bifunctional DO3A-N-( $\alpha$ -amino) propionate ligands with Mg(II), Ca(II), Cu(II), Zn(II) and Lanthanide(III) ions: thermodynamic stability, formation and dissociation kinetics and solution dynamic NMR studies*, *Molecules*, 26, 4956, 2021.  
DOI: 10.3390/molecules26164956
171. Geraldes, C. F. G. C., Castro, M. M. C. A., Peters, J. A., *Mn(III) porphyrins as potential MRI contrast agents for diagnosis and MRI-guided therapy*, *Coord. Chem. Rev.*, 445, pp 214069, 2021.  
DOI:10.1016/j.ccr.2021.214069
172. Librando, I. L., Mahmoud, A. G., Carabineiro, S. A. C., Guedes da Silva, M. F. C., Geraldes, C. F. G. C., Pombeiro, A. J. L., *Synthesis of a novel series of Cu(I) complexes bearing alkylated 1,3,5-triaza-7-Phosphaadamantane as homogeneous and carbon-supported catalysts for the synthesis of 1- and 2-substituted-1,2,3-triazoles*, *Nanomaterials*, 11, 2702, 2021.  
DOI:10.3390/nano11102702
173. Librando, I. L., Mahmoud, A. G., Carabineiro, S. A. C., Guedes da Silva, M. F. C., Geraldes, C. F. G. C., Pombeiro, A. J. L., *The catalytic activity of carbon-supported Cu(I)-phosphine complexes for the microwave-assisted synthesis of 1,2,3-triazoles*, *Catalysts*, 11, 185, 2021.  
DOI:10.3390/catal11020185



174. Majdoub, S., Garda, Z., Oliveira, A. C., Relich, I., Pallier, A., Lacerda, S., Hureau, C., Geraldès, C. F. G. C., Morfin, J.-F., Tóth, É., *Concentration-dependent interactions of amphiphilic PiB-derivative metal complexes with amyloid peptides A $\beta$  and amylin*, *Chem. Eur. J.*, 27, pp 2009-2020, 2021.

DOI:10.1002/chem.202004000

175. Moreno, M. J., Martins, P. A. T., Bernardino, E. F., Abel, B., Ambudkar, S. V., *Characterization of the Lipidome and Biophysical Properties of Membranes from High Five Insect Cells Expressing Mouse P-Glycoprotein*, *Biomolecules*, 11, pp 426, 2021.

DOI: 10.3390/biom11030426

176. Paketuryte, V., Petrauskas, V., Zubriene, A., Abian, O., Bastos, M., Chen, W. Y., Moreno, M. J., Krainer, G., Linkuviene, V., Sedivy, A., Velazquez-Campoy, A., Williams, M. A., Matulis, D., *Uncertainty in protein-ligand binding constants: asymmetric confidence intervals versus standard errors*, *Eur. Biophys. J. Biophys. Lett.*, 50, pp 661-670, 2021.

DOI:10.1007/s00249-021-01518-4

177. Pereira, D. A., Silva, A. D., Martins, P. A. T., Piedade, A. P., Martynowych, D., Veysset, D., Moreno, M. J., Serpa, C., Nelson, K. A., Arnaut, L. G., *Imaging of photoacoustic-mediated permeabilization of giant unilamellar vesicles (GUVs)*, *Scientific Reports*, 11, pp 2775, 2021.

DOI:10.1038/s41598-021-82140-4

178. Pimenta, S., Silva, C. G., Flora, S., Hipólito, N., Burtin, C., Oliveira, A., Morais, N., Brites-Pereira, M., Carreira, B. P., Januário, F., Andrade, L., Martins, V., Rodrigues, F., Brooks, D., Marques, A., Cruz, J., *What Motivates Patients with COPD to Be Physically Active? A Cross-Sectional Study*, *Journal of Clinical Medicine*, 10, pp. 5631, 2021.

DOI: 10.3390/jcm10235631

179. Pires, C. L., Praça, C., Martins, P. A. T., 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*, *Pharmaceutics*, 13, pp 1563, 2021.

DOI:10.3390/pharmaceutics13101563

180. Rodrigues, E. T., Nascimento, S. F., Pires, C. L., Godinho, L. P., Churro, C., Moreno, M. J., *Determination of intestinal absorption of the paralytic shellfish toxin GTX-5 using the Caco-2 human cell model*, *Environmental Science and Pollution Research*, 28, pp 67256-67266, 2021.

DOI:10.1007/s11356-021-15342-y

181. Rosário-Ferreira, N., Baptista, S. J., Barreto, C. A. V., Rodrigues, F. E. P., Silva, T. F. D., Ferreira, S. G. F., Melo, R., Victor, B. L., Machuqueiro, M., Moreira, I. S., *In-silico end-to-end protein-ligand interaction characterization pipeline: the case of SARS-CoV-2*, *Synthetic Biology*, 10, pp. 3209-3235, 2021.

DOI: 10.1021/acssynbio.1c00368

182. Rosário-Ferreira, N., Guimarães, V., Costa, V. S., Moreira, I. S., *SicknessMiner: a deep-learning-driven text-mining tool to abridge disease-disease associations*, *BMC Bioinformatics*, 22, pp. 482, 2021.

DOI: 10.1186/s12859 021 04397 w

183. Rosário-Ferreira, N., Marques-Pereira, C., Pires, M., Ramalhão, D., Pereira, N., Guimarães, V., Costa, V. S., Moreira, I. S., *The treasury chest of text-mining: piling available resources for powerful biomedical text-mining*, *BioChem.*, 1(2), pp. 60-80, 2021.  
DOI: 10.3390/biochem1020007
184. Silva, C. G., Gordo, S., Rodrigues, A. C., Henriques, C., Rosa, M., *Exploring the Relationship between Socioemotional Skills and Decision-Making Styles in Health Students*, *IAFOR Journal of Education*, 9(5 – Undergraduate Education): 49, 2021.  
DOI: 10.22492/ije.9.5
185. Rama, N., Parente, D., Silva, C. G., Neves, M., Figueiredo, N., Alves, P., Clara, P., Amado, S., Lourenço, O., Guarino, M. P., Rocha, A., Castro-Poças, F., Pimentel, J., *Anastomotic Leak in Colorectal Cancer Surgery: From Diagnosis to Management or Failure – A Retrospective Cohort Study*, *Surgery, Gastroenterology and Oncology*, 26, pp. 183-190, 2021.  
DOI: 10.21614/sgo-26-3-336
186. Silva, I. M. V., Machado, F., Moreno, M. J., Nunes, C., Coimbra, M. A., Coreta-Gomes, F., *Polysaccharide Structures and Their Hypocholesterolemic Potential*, *Molecules*, 26, pp 26154559, 2021.  
DOI:10.3390/molecules26154559
187. Suh, E. H., Geraldes, C. F. G. C., Chirayil, S., Faubert, B., Ayala, R., 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*, *Cancer & Metabolism*, 9, 38, 2021.  
DOI:10.1186/s40170-021-00267-4
188. Trigueiro-Louro, J., Santos, L. A., Almeida, F., Correia, V., Brito, R. M. M., Rebelo-de-Andrade, H., *NS1 protein as a novel anti-influenza target: Map-and-mutate antiviral rationale reveals new putative druggable hot spots with an important role on viral replication*, *Virology*, 565, pp 106-116, 2021.  
DOI: 10.1016/j.virol.2021.11.001

**ARTIGOS PUBLICADOS EM REVISTAS NACIONAIS  
COM REVISÃO POR PARES**

1. Rodrigues, Sérgio P. J., *A Corrosão do Ferro. Boletim da Sociedade Portuguesa de Química* 45(160), 65, 2021.  
DOI: 10.52590/M3.P695.A30002374
2. Rodrigues, Sérgio P. J., *Coisas Que Não Vemos a Olho Nu. Boletim da Sociedade Portuguesa de Química* 45(160), 66, 2021.  
DOI: 10.52590/M3.P695.A30002375
3. Rodrigues, Sérgio P. J., *Magalhães e a química - reflexos indiretos. Boletim da Sociedade Portuguesa de Química* 45(161), 136-139, 2021.  
DOI: 10.52590/M3.P696.A30002406
4. Rodrigues, Sérgio P. J., *A Verdadeira História da Penicilina. Boletim da Sociedade Portuguesa de Química* 45(162), 76, 2021.  
DOI: 10.52590/M3.P697.A30002446
5. Rodrigues, Sérgio P. J., *Pilhas e Baterias. Boletim da Sociedade Portuguesa de Química* 45(162), 77, 2021.  
DOI: 10.52590/M3.P697.A30002447
6. Brandão, P., Burke, A. J., Pineiro M., *Reações Multicomponente – Uma Ferramenta Valiosa na Descoberta e Produção de Fármacos, Química*, Boletim da Sociedade Portuguesa de Química, 159, pp 264-276, 2021.  
DOI: 10.52590/M3.P694.A30002331
7. Pinheiro, D., Brandão, P., Seixas de Melo, J. S., Pineiro, M., *Triptantrina: da Natureza ao Laboratório, Química*, Boletim da Sociedade Portuguesa de Química, 2021, aceite para publicação.
8. Alves, C., Pina, J., Pineiro, M., Cardoso, A. L., *A Química Escondida nos Alimentos, Química*, Boletim da Sociedade Portuguesa de Química, 2021, aceite para publicação.  
<https://b-quimica.spq.pt/files/BSPQ/40.pdf>
9. Santos, P. P., Vaz, P. G., Gaudêncio, A. S. F., Morgado, M., Pereira, N. A. M., Pineiro, M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Cardoso, J., *Compressive single pixel phosphorescence lifetime and intensity simultaneous imaging: a pilot study using oxygen sensitive biomarkers, Proc. SPIE 11775, Integrated Optics: Design, Devices, Systems and Applications VI*, 1177511, 2021.  
DOI: 10.1117/12.2588266
10. Pinheiro, D., Brandão P., Seixas de Melo, J. S., Pineiro M., *Triptantrina: da Natureza ao Laboratório*, Boletim da Sociedade Portuguesa de Química, 45, 162, pp 195-200, 2021.  
DOI: 10.52590/M3.P697.A30002440.
11. Lopes, A., Vieira, C., Ferreira, J., Martins, M., Silva, C. G., Rosa, M., *Associação entre a velocidade da marcha e a participação social em pessoas com esclerose múltipla: uma revisão sistemática, Revista Salutis Scientia*, 13, 1-16, 2021.  
URL: <http://www.salutisscientia.esscvp.eu/Site/download.aspx?artigoid=32203>

## COMUNICAÇÕES APRESENTADAS EM REUNIÕES CIENTÍFICAS

### Lições Plenárias, Comunicações e Pósteres Apresentados em Reuniões Científicas Internacionais

1. Fausto, R., *Light-Induced In Situ Generation of reactants in Cryogenic Matrices and Spectroscopic Analysis of Products of Chemical Reactions Following the Quantum Tunneling Mechanism*, R. Fausto. Analyticon 2020, San Francisco, California, USA, 2021. **Plenary Lecture**
2. Nogueira, B. A., Milani, A., Paixão, J. A., Castiglioni, C., Fausto, R., *Design, Synthesis and Characterization of a Novel Color Polymorphic Material*, 15th International conference on materials chemistry (MC15), Dublin, Ireland, 2021. **Poster**
3. Fausto, R., *IR-Induced and Tunneling Reactions in Cryogenic Matrices*, European Meeting on Physical Organic Chemistry, Wroclaw, Poland, 2021. **Plenary Lecture**
4. Fausto, R., *IR-Induced and Tunneling-Driven Reactions in Cryogenic Matrices*, 1º Encontro Integrado da PPG em Química da Unifesspa, Marabá (Pará), Brasil, 2021. **Plenary Lecture**
5. Fausto, R., *How to Write a Scientific Paper*, 1º Encontro Integrado da PPG em Química da Unifesspa, Marabá (Pará), Brasil, 2021. **Oral Presentation**
6. Brás, E. M., Suhm, M. A., Fausto, R., *Jet-Cooled and Matrix-Isolated Radicals: Monitoring Interactions and Reactions through IR Spectroscopy*, Institut für Physikalische Chemie (IPC), Göttingen, **Invited Oral Presentation**
7. Ekawa, B., Eusébio, M. E. S., Castro, R. A. E., Caires, F., *Characterization and thermoanalytical study of novel valsartan coamorphous systems*, 6th Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry & 15th Mediterranean Conference on Calorimetry and Thermal Analysis, Split, Croácia, 2021. **Comunicação oral.**
8. Silva, J. F. C., Rosado, M. T. S., Silva, P. S. P., Silva, M. R., Eusébio, M. E. S., *The role of co-formers on the thermal behavior of nateglinide co-amorphous systems*, Multiscale Phenomena in Condensed Matter, Online conference for young researchers, Kraków, 2021. **Comunicação oral.**
9. Santos, J. A. V., Baptista, J. A., Santos, I. C., Maria, T. M. R., Canotilho, J., Castro, R. A. E., Eusébio, M. E. S., *Solid State Chemistry: Pharmaceutical Cocrystal Engineering and Nanosizing*, 3rd Training School: "Mechanochemistry: from supramolecular to covalent bonds - synthesis and structural characterization" organized by COST Action 'Mechanochemistry for Sustainable Industry' (CA18112) transmitido em linha a partir de Lisboa, 2021. **Comunicação oral.**
10. Arnaut, L. G., *"Selecting photosensitizers for specific applications: Tumors, skin diseases, bacteria and virus"*, Mini-IPA Shanghai International Forum, 23 de Maio de 2021, online de Xangai (China). **Lição Plenária**

11. Arnaut, L. G., *“Translation of a combination between a laser device and a medicinal agent, from bench to bedside”*, Lasers Fighting Cancer Symposium of LaserLab Europe, 25 de Maio de 2021, online de Berlin (Alemanha). **Lição Convidada**
12. Arnaut, L. G., *“Photosensitizers for Photodynamic Therapy”*, HighLIGHTing Science Meeting of Polythea, 27-28 de Maio de 2021, online de Wroclow (Polónia). **Lição Convidada**
13. Arnaut, L. G., *“Photodynamic Therapy in Oncology and Infectious Diseases: Opportunities for Further Progress”*, ZEISS Symposium 2021 “Optics in the Medical World”, 8-9 de Junho de 2021, online de Jena (Alemanha). **Lição Convidada**
14. Arnaut, L. G., *“Photodynamic therapy for Covid-19 and other infectious diseases”*, 19<sup>th</sup> Congress of the European Society for Photobiology, 30 de Agosto a 3 de Setembro de 2021, online the Salzburg (Áustria). **Lição convidada**
15. Arnaut, L. G., *“Terapia Fotodinâmica: Princípios e Aplicações”*, XXVIII Semana da Física da Universidade Federa de Goiânia, 17 de Novembro de 2021, online de Goiânia (Brasil). **Lição convidada**
16. Arnaut, Z. A., Aroso, R. T., Nunes, S. C. C., Pais, A. A. C. C., Pinto, S. M. A., Pereira, M. M., *Design and scale-up of amphiphilic cationic meso-imidazolyl porphyrin-based photosensitizers for development of potential antimicrobial agents*, ECHC - XXIX European Colloquium on Heterocyclic Chemistry, online, 2021. **Comunicação Oral**
17. Arnaut, Z. A., Vinagreiro, C. S., Aroso, R. T., Nunes, S. C. C., Pais, A. A. C. C., Pinto, S. M. A., Arnaut, L. G., Pereira, M. M., *Computational design and synthesis of imidazolyl-tetrapyrrolic macrocycles-based photosensitizers for photodynamic inactivation of micro-organisms*, 11th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-11) Virtual meeting, online, 2021. **Poster**
18. Aroso, R. T, Calvete, M. J. F., Gonzalez, A. C. S., Tomé, V. A., Damas, L., Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M., *Sustainable methodologies for the synthesis of metallophthalocyanines*, 11th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-11) Virtual Meeting, online, 2021. **Comunicação oral**
19. Aroso, R. T., Calvete, M. J. F., Pucelik, B., Dubin, G., Arnaut, L. G., Dabrowski, J. M., Pereira, M. M., *Cationic imidazolyl photosensitizers for inactivation of microorganisms in sub-micromolar concentrations*, 11th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-11) Virtual Meeting, online, 2021. **Poster**
20. Carrilho, R. M. B., Gonzalez, A. C. S., Aroso, R. T., Rodrigues, F. M. S., Pereira, M. M., *Catalytic Synthetic Approaches Towards Photosensitive Bio-Polymers*, International Symposium on Synthesis and Catalysis (ISySyCat2021), Évora, Portugal, 2021. **Comunicação Oral**
21. Dias, L. D., Zangirolami, A. C., Rodrigues, F. M. S., Blanco, K. C., Pereira, M. M., Bagnato, V. S., *Desenvolvimento de Tubo Endotraqueal Fotoantimicrobiano: o uso da Terapia Fotodinâmica no Combate de Pneumonia Associada à Ventilação Mecânica*, XXII Congresso Brasileiro de Infectologia, Goias, Brasil, 2021. **Comunicação Oral**

22. Donohoe, C., Scharbele, F., Pereira, M. M., Mathias, O. Senge, Arnaut, L. G., Gomes-da-Silva, L. C., *The impact of Atropisomerism on Redaporfin-PDT efficacy*, 19<sup>th</sup> Congress of the European Society for Photobiology, Salzburg, Austria, August 30<sup>th</sup> to September 3<sup>rd</sup>, 2021. **Selected oral communication.**

23. Donohoe, C., Scharbele, F., Pereira, M. M., Senge, M. O., Arnaut, L. G., Gomes-da-Silva, L. C., *The impact of Atropisomerism on redaporfin-PDT efficacy*. 1<sup>st</sup> HighLIGHTing Science Meeting organized by POLYTHEA students, ISBN 978-83-7493-169-4, Abstract page 72. 27-28 de Maio de 2021, online de Wroclow (Polónia). **Flash presentation**

24. Donohoe, C., Scharbele, F., Pereira, M. M., Mathias, O. Senge, Arnaut, L. G., Gomes-da-Silva, L. C., *The impact of Atropisomerism on Redaporfin-PDT efficacy*. Abstract page 4. The 5<sup>th</sup> Photodynamic Day, 18<sup>th</sup> May 2021, Istanbul Turkey. **Poster**, this communication received one of the three best poster awards.

25. Donohoe, C., Scharbele, F., Pereira, M. M., Mathias, O. Senge, Arnaut, L. G., Gomes-da-Silva, L. C., *The impact of Atropisomerism on redaporfin-PDT efficacy*. ACS Spring 2021. 5<sup>th</sup> April 2021. **Poster**

26. Duque-Prata, A., Pinto, T. P., Serpa, C., *Spectroscopic Characterization of NIR absorbing Charge-Transfer Complexes*, Iberian Symposium of Young Photochemists, 18-22 de Outubro de 2021, online. **Poster**

27. Felgueiras, A. P., Rodrigues, F. M. S., Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M., *Hydroformylation-based reactions using chiral binaphthyl monophosphite ligands*, International Symposium on Synthesis and Catalysis (ISySyCat2021), Évora, Portugal, 2021. **Poster**

28. Ferreira-Gonçalves, T., Costa, E., Coelho, J. M. P., Gaspar, M. M., Ascensão, L., Faísca, P., Figueiredo, I. V., García-González, C. C., Ferreira, D., Ferreira, H., Reis, C. P., *Gold nanoparticles as a part of a photothermal therapy system*, 31st Annual Conference of the European Society for Biomaterials (ESB 2021), Porto, 2021. **Comunicação Oral.**

29. Ferreira-Gonçalves T., Costa E., Coelho, J. M. P., Gaspar, M. M., Ascensão, L., Faísca, P., Figueiredo, I. V., Ferreira, D., Ferreira, H., Reis, C. P., *A step forward in breast cancer research: A preliminary photothermal approach using gold nanoparticles*, iMed.ulisboa meeting 2021. **Poster**

30. Gierlich, P., Donohoe, C., Behan, K., Kelly, D., Gomes-da-Silva, L. C., Senge, M. O., *Covalently cross-linked tetrafunctionalized m-THPC chitosan hydrogels as drug delivery platforms in the treatment of melanoma*, 19<sup>th</sup> Congress of the European Society for Photobiology, Salzburg, Austria, August 30<sup>th</sup> to September 3<sup>rd</sup>, 2021. **Selected oral communication**

31. Gierlich, P., Donohoe, C., Behan, K., Gomes-da-Silva, L. C., Kelly, D., Senge, M. O., *Covalently cross-linked tetrafunctionalized m-THPC chitosan hydrogels as delivery platforms*. 1<sup>st</sup> HighLIGHTing Science Meeting organized by POLYTHEA students. ISBN 978-83-7493-169-4, Abstract page 76. 27-28 de Maio de 2021, online de Wroclow (Polónia). **Flash presentation**

32. Gierlich, P., Donohoe, C., Behan, K., Gomes-da-Silva, L. C., Kelly, D., Senge, M. O., *Covalently cross-linked tetrafunctionalized m-THPC chitosan hydrogels as delivery platforms*. Abstract page 22. The 5<sup>th</sup> Photodynamic Day, 18<sup>th</sup> May 2021, Istanbul Turkey. **Poster**, this communication received one of the three best poster awards.
33. Gierlich, P., Donohoe, C., Behan, K., Gomes-da-Silva, L. C., Kelly, D., Senge, M. O., *Covalently cross-linked tetrafunctionalized m-THPC chitosan hydrogels as delivery platforms*. ACS Spring meeting 2021. 5<sup>th</sup> April 2021. **Poster**
34. Gomes-da-Silva, L. C., Arnaut L. G., *Defeat cancer with oxidative stress generated by photodynamic therapy*, 23<sup>rd</sup> international conference on oxidative stress reduction, redox homeostasis and antioxidants, Paris redox 2021, 13-15<sup>th</sup> October, 2021. Selected **oral communication**. This communication received one of the three best communication awards.
35. Gonçalves, T., Costa, E., Coelho, J. M. P., Gaspar, M. M., Ascensão, L., Figueiredo, I. V., Ferreira, D., Ferreira, H., Reis, C. P., *A Step Forward in Breast Cancer Research: Gold Nanoparticles as Photothermal Therapy Enhancers*, Advanced Technologies for the processing and characterization of nanostructured materials, Krakow, Poland, 2021. **Comunicação Oral**.
36. Gonzalez, A. C. S., Cruz, I. G., Aroso, R. T., Tavares, I., Rodrigues, F. M. S., Dias, L. D., Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M., *Sustainable Synthesis of Photosensitive Polymeric Materials for Antimicrobial Applications*, EFMC-YMCS Young Medicinal Chemists' Symposium, online, 2021. **Poster**
37. Mendes, M. I. P., Schaberle, F. A., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., Arnaut, L. G., *Phthalocyanine loaded nanodroplets for Photoacoustic Tomography*, Internation School of Quantum Electronics 64<sup>th</sup> Course – Progress in Photoacoustic & Photothermal Phenomena. Focus on Biomedical, Nanoscale, NDE, Gas Sensing and Thermophysical Phenomena ad Technologies. Erice, Sicily, 16 – 23 October 2021. **Comunicação oral**
38. Lima, B., Tão, H., Pereira, M. M., Gomes-da-Silva, L. C., Arnaut, L. G., *A low molecular weight carboxamide halogenated bacteriochlorin for the treatment of highly aggressive tumors*, 19<sup>th</sup> Congress of the European Society for Photobiology, Salzburg, Austria, August 30<sup>th</sup> to September 3<sup>rd</sup>, 2021. **Selected oral communication**
39. Pereira, D. A., Silva, A. D., Martins, P. A. T., Piedade, A. P., Martynowich, D., Veysset, D., Moreno, M. J., Serpa, C., Nelsen, K. A., Arnaut, L. G., *Controlled Release of Macromolecules with Photoacoustic Waves*, 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress, Coimbra, Portugal. 14-16 June 2021. **Comunicação oral online**
40. Pereira, D. A., Silva, A. D., Serpa, C., Arnaut, G. L., *Carbon nanotubes based materials for photoacoustic-mediated biological barriers transient permeability enhancement*, Internation School of Quantum Electronics 64<sup>th</sup> Course – Progress in Photoacoustic & Photothermal Phenomena. Focus on Biomedical, Nanoscale, NDE, Gas Sensing and Thermophysical Phenomena ad Technologies. Erice, Sicily, 16 – 23 October 2021. **Poster**
41. Pereira, M. M., *Cationic Imidazolyl Photosensitizers - Highly Efficient Molecules for Photodynamic Inactivation of Multidrug-resistant Bacteria and Biofilms*, 11th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-11) Virtual Meeting, online, 2021. **Comunicação oral convidada**

42. Piccirillo, G., Eusébio, M. E. S., M. M., Calvete, M. J. F., *Immobilized porphyrins as reusable heterogeneous catalyst for antibiotic degradation in human activity effluents*, 11th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-11) Virtual Meeting, online, 2021.

**Comunicação oral**

43. Piccirillo, G., Maldonado-Carmona, N., Marques, D. L., Villandier, N., Leroy-Lhez, S., Eusébio, M. E. S., M. M., Calvete, M. J. F., *Tetrapyrrolic macrocycles encapsulated in lignin-based nanoparticles - Highly efficient catalysts for antibiotics photodegradation*, 11th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-11) Virtual Meeting, online, 2021. **Poster**

44. Pinto, S. M. A., Tomé, V. A., Gawne, P. J., Rosales, R. T. M., Abrunhosa, A. J., Geraldés, C. F. G. C., Pereira, M. M., *New Tetrapyrrolic Macrocycles for Medical Imaging: Synthesis and Evaluation*, 11th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-11) Virtual Meeting, online, 2021. **Comunicação oral**

45. Rodrigues, F. M. S., Piccirillo, G., Gonzalez, A. C. S., Aroso, R. T., Felgueiras, A. P., Marques, D. L., Masliy, V. Carrilho, R. M. B., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., *Reusable catalysts for the Development of Sustainable Processes*, Catalysis Science & Technology 10th Anniversary Symposium, online, Reino Unido, 2021. **Poster**

46. Serpa, C., *Os Gritos das Moléculas. Fotoacústica: Fundamentos, Materiais e Aplicações*, Palestras do Programa de Pós-graduação em Química, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, RS, Brazil, 3 November, 2021. **Apresentação Oral por videoconferência**

47. Serpa, C., *Piezoporation: How Light can Make Your Skin Brighter and More Hydrated*, 1<sup>st</sup> HighLIGHTing Science Meeting, Polythea PhD Programme, 27 May 2021. **Apresentação Oral por videoconferência**

48. Rodrigues, Sérgio P. J., *História da química computacional e do uso dos computadores em química*. II Congresso internacional de História da Ciência e Ensino (online, São Paulo, Brasil), 26-29 de Outubro de 2021. **Minicurso**.

49. Rodrigues, Sérgio P. J., *A history of psychotropic drugs development: Foolish hope, bare greedy, both or none?* European Conference on Mental Health 2021 (online, Helsinki, Finland), September 29-October 1, 2021. **Comunicação oral**.

50. Rodrigues, Sérgio P. J., *Química é... vida!* III CONDEQUI (online, Brasil), 29 de Março a 4 de Abril de 2021. **Comunicação oral**.

51. Rodrigues, Sérgio P. J., 9<sup>o</sup> Congresso, *Olhares sobre a educação*/2th International Congress Perspectives on Education (online, Viseu) 25-27 Novembro de 2021. **Comunicação oral**.

52. Rodrigues, Sérgio P. J., *Associação entre loucura e criatividade: o que dizem as evidências*. XII Congresso Internacional de História da Loucura, Psiquiatria e Saúde Mental. (Online, Coimbra) 12-14 de julho de 2021. **Comunicação oral**.

53. Caridade, Pedro J. S. B., *Copernicus CAMS air pollution usecase*. O Programa Europeu para a Observação da Terra hosted by Portugal Space (Lisboa, Maio 13, 2021). **Lição convidada**.



54. Caridade, Pedro J. S. B., *Workshop on S2CP data applied to cities2030* (16th December 2021). **Workshop.**

55. Alves, A. J. S., Bártolo, I., Alves, N. G., Taveira, N., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Novel Chiral Spiro- $\beta$ -Lactams from Alkylidenepenicillanates via Cycloaddition Reactions: Synthesis and Anti-HIV Activity*, International Symposium on Synthesis and Catalysis 2021 (ISySyCat2021), Évora, Portugal, 2021. **Comunicação Oral**

56. Peña, D. C. P., Firpo, G., Soares, M. I. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., Pierella, L., Peláez, W. J., *Determinación de los Parámetros Cinéticos de las Reacciones Térmicas de 3-Bencil-trifluorometil-pirrolo Sulfonas*, XXIII Simposio Nacional de Química Orgánica (XXIII SINAQO), Córdoba, Argentina, formato digital, 2021. **Poster**

57. Braz, J., Costa, B. D. P., Lopes, S. M. M., Laranjo, M., Pineiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *trans-A<sub>2</sub>B-Corroles Containing an Oxime Moiety: Synthesis and Photodynamic Activity Against Lung Cancer Cells*, International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-11), formato digital, 2021. **Poster**

58. Costa, B. D. P., Braz, J., Lopes, S. M. M., Laranjo, M., Pineiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Corroles & hydrazones: two allies in the fight against lung cancer*, International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-11), formato digital, 2021. **Poster**

59. Grosso, C., Alves, N. G., Cardoso, A. L., Lemos, A., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Selective Synthesis of 3-Tetrazolyl-indoles from 2-(Tetrazolyl-5-yl)-2H-azirines and Arynes*, International Symposium on Synthesis and Catalysis 2021 (ISySyCat2021), Évora, Portugal, 2021. **Poster**

60. Pineiro, M., *Mechanochemistry with Single Screw Device*, Virtual Lab Session at Online Training School Webcasted from Lisbon, Mechanochemistry: From Supramolecular to Covalent Bonds – Synthesis and Structural Characterization, Lisboa, Portugal, 2021. **Lição Convidada**

61. Brandão, P., Marques, C., Pineiro, M., Burke, A. J., *Istain as a Central “Puzzle Piece” for Multicomponent Reactions (MRCs)*, International Symposium on Synthesis and Catalysis, (ISySyCat2021), Évora, Portugal, 2021. **Poster, Prémio do Melhor Poster na área de Química Orgânica e Biomolecular**

62. Ribeiro, A. C. F., *Multicomponent diffusion of aqueous systems containing drugs, salts and carriers*, 1st Workshop of Basic Sciences: a closeup to Engineering Applications, (on-line), Universidade de America, Bogota, Colombia. **Lição convidada.**

63. Garcia, R. A., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *The functionalization of carbohydrate polymers with  $\beta$ -cyclodextrin enhances binding of monophenols*, 16º Congresso da Sociedade Brasileira de Polímeros (CBPol), Ouro Preto, Minas Gerais, Brasil, 2021. **Comunicação oral**

64. Utzeri, G., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Synthesis and characterization of heptakis-aminocyclodextrin nanosponges*, 16º Congresso da Sociedade Brasileira de Polímeros (CBPol), Ouro Preto, Minas Gerais, Brasil, 2021. **Comunicação oral**

65. Sharma, M., Aguado, R., Murtinho, D., Valente, A. J. M., Ferreira P. J. T., *Ball milling: a new development in the synthesis of cationic starch ester*, 7th International Polysaccharide Conference, Nantes, France. **Comunicação oral**
66. Estesó, M. A., *Mean ionic activity coefficients: their determination from emf measurements*, 1<sup>st</sup> Workshop of Basic Sciences: a Closeup to Engineering Applications, Bogotá, Colombia, May 2021. **Plenary Lecture (streaming)**
67. Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., Estesó, M. A., Rodrigo, M. M., Cabral, A. M. T. D. P. V., Leais, D. G., *Multicomponent transport by diffusion of drugs in carriers-containing aqueous solutions*, 14th International Meeting on Thermodiffusion (IMT14), Trondheim, Norway, May 2021. **Comunicação oral.**
68. Gomes, B. O., Aguado, R., Valente, A. J. M., *Polyelectrolyte-based ink with RGB emission properties for safety tagging*, 16<sup>o</sup> Congresso da Sociedade Brasileira de Polímeros (CBPol), Ouro Preto, Minas Gerais, Brasil, 2021. **Comunicação oral**
69. Anjos, O., Guiné, R., Campos, M. G., Paula, V., Estevinho, L., *Bee Pollen A Healthy Food Product*, International Webinar on Nutrition and Health, March 12-13, 2021. **Comunicação Oral Plenária e por convite.**
70. Anjos, O., Lavado, I., Vilas-Boas M., Campos, M. G., *Need and development of Bee Pollen Standardization*, Millenium, 2(ed espec nº8): 87.2021.
71. Silva, C. V. M., Santos, J. R. C., Rodrigo, M. M., Ribeiro, A. C. F., Moço, G., Cabral, A. M. T. D. P. V., Valente, A. J. M., Marques, J. M. C., Estesó, M. A., Abreu, P. E., *Insight into the Interaction of NaCl with sugars from computer simulations*, XXI EuroFoodChem Conference, online, 2021. **Poster**
72. Musilová, L., Mráček, A., Kašpárková, V., Minářík, A., Azevedo, E. F. G., Veríssimo, L. M. P., Rodrigo, M. M., Estesó, M. A., Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., *Effect of Hofmeister Ions on Transport Properties of Aqueous Solutions of Sodium Hyaluronate*, 7th International Iberian Biophysics Congress, Coimbra (online), 2021. **Poster**
73. Fangaia, S. I. G., Nicolau, P. M. G., Guerra, F. A. D. R. A., Rodrigo M., Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., Estesó, M. A., *Cobalt-chromium Dental Alloys: Concern about the Toxic Impact of Ions released in the Oral Cavity analyzed by Diffusion Measurements*, 7th International Iberian Biophysics Congress, Coimbra (online), 2021. **Poster**
74. Ferreira, A. C. S., Carta, A. M. S., Bértolo, R., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Effect of gum Arabic in the physical and mechanical properties of tissue papers*, 16<sup>o</sup> Congresso da Sociedade Brasileira de Polímeros (CBPol), Ouro Preto, Minas Gerais, Brasil, 2021. **Poster**
75. Pedro, S., Araújo, J., Carmo, C., Laranjo, M., Botelho, M. F., Sobral, A. J. F. N., *Synthesis of New Bodipys for Photodynamic Therapy on Human Lung Cancer Cell Line H1299*, 1st HighLIGHTing Science Meeting & PANIC 2021 PhoBiA Annual Nanophotonics International Conference, Wroclaw, Poland, 26 - 28 Maio 2021. **Poster**
76. Santos, M. G., Araújo, J., Carmo, C., Laranjo, M., Botelho, M. F., Sobral, A. J. F. N., *New BODIPYs for PET Diagnosis on the A549 Lung Cancer Cell Line*, 1st HighLIGHTing Science Meeting & PANIC

2021 PhoBiA, Annual Nanophotonics International Conference, Wroclaw, Poland, 26 - 28 Maio 2021. **Poster**

77. Santos, L. K., Araújo, J., Carmo, C., Rodrigues, A. C. B., Seixas de Melo, J. S., Sobral, A. J. F. N., *Synthesis and characterization of a BODIPY dimer for photodynamic therapy*, 1st HighLIGHTing Science Meeting & PANIC 2021 PhoBiA, Annual Nanophotonics International Conference, Wroclaw, Poland, 26 - 28 Maio 2021. **Poster**

78. Ojeda, G., Gil, J. M., Sobral, A. J. F. N., Bachmann J., "Soil-water contact angle as a tool to evaluate biochar aging in soils", XI CONGRESO IBÉRICO DE AGROINGENIERÍA, 11-12 de Novembro de 2021. **Poster**

79. Araújo, J. C., Pereira, L. C. J., Sobral, A. J. F. N., "New Biomaterials Based in Metal Organic Frameworks (BioMOFs) for Cancer Photodiagnostic and Cancer Magnetic Hyperthermia Therapy", Advanced Materials & ChemMat Doctoral Programme Workshop - IST/CTN, Instituto Superior Técnico, Lisboa, 11-12 Novembro, 2021. **Poster**

80. Fangaia, S. I. G., Nicolau, P. M. G., Guerra, F. A. D. R. A., Rodrigo, M. M., Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., Marques, J. M. C., Santos, J. R. C., Estesó, M. A., Cabral, A. M. T. D. P., Lobo, V. M. M., "Diffusion of aluminium and vanadium metal ions, in different environments", CQC Day, Coimbra, 2021. **Poster**

81. Sofio, S. P. C., Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., Paiva, I. M. R., "Study of hydrodynamics in karst aquifers from hydrochemical analysis in springs", CQC Day, Coimbra, 2021. **Poster**

82. Galindres, D. M., Vargas, E. F., Ribeiro, A. C. F., Rodrigo, M. M., Estesó, M. A., "Study for aqueous solutions of resorcin[4]arene sulphonated and bovine serum albumin", CQC Day, Coimbra, 2021. **Poster**

83. Barros, M. C. F., Faro, M. P. R. T., Ribeiro, A. C. F., Santos, C. I. A. V., *High pressure Taylor setup – First results in supercritical carbon dioxide*, 14th Physical Chemistry Meeting (online), March 29-31, 2021, University of Coimbra, Portugal **Comunicação oral**

84. Santos, C. I. A. V., Barros, M. C. F., Ribeiro, A. C. F., Mialdun, A., Shevtsova, V., *Investigation of the Soret coefficient in liquid mixtures: TEG – water*, 14th International Meeting on Thermodiffusion (online)– May 25-27, 2021 - Trondheim, Norway. **Comunicação oral**

85. Faro, M. P. R. T., Barros, M. C. F., Ribeiro, A. C. F., Santos, C. I. A. V., *Binary diffusion coefficients for hydrocarbons in supercritical carbon dioxide – Development of a Taylor dispersion setup for SFCs*, 14th Physical Chemistry Meeting (online), March 29-31, 2021, University of Coimbra, Portugal. **Poster**

86. Barros, M. C. F., Ribeiro, A. C. F., Faro, M. P. R. T., Santos, C. I. A. V., *Effect of some industrial solvents into fluorocarbon elastomer*, CQC Day 2021, December 15, 2021, University of Coimbra, Portugal. **Poster.**

87. Santos, C. I. A. V., Barros, M. C. F., Faro, M. P. R. T., Ribeiro, A. C. F., *Diffusion of Toluene and Benzene in Supercritical CO<sub>2</sub>*, CQC Day 2021, December 15, 2021, University of Coimbra, Portugal. **Poster.**

88. Pinheiro, D., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *A Comprehensive Investigation of Tryptanthrin Derivatives*, Iberian Symposium of Young Photochemists (ISYP), Royal Spanish Chemical Society, 2021. **Comunicação oral**

89. Rodrigues, A. C. B., Peixoto, M., Gomes, C., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *Diphenylbenzofulvene as White Light Emitters*, Iberian Symposium of Young Photochemists (ISYP), Royal Spanish Chemical Society, Online, 2021. **Comunicação Oral.**

90. Seixas de Melo, J. S., *When the Non-Emissive Goes Emissive: Aggregation Induced Emission in Small Molecules and Polymers*, International Conference on Aggregate Science - 20th Anniversary of AIE Research, China, 2021, **Lição Convidada.**

91. Cova, T. F., Mendes, M., Basso, J., Ramos, M. L., Vitorino, R., Sousa, J., Pais, A., Vitorino, C., *Computational design of peptide-carbohydrate conjugates to improve drug recognition and tumor targeting*, International Symposium on Biomedical Engineering and Computational Biology (BECB 2021), online, August 2021. **Comunicação Oral.**

92. Mendes, M., Vale, N., Sousa, J., Pais, A., Vitorino, C., *Unveiling the potential of CPPs in rerouting nanoparticles to glioblastoma treatment*, Controlled Release Society, Annual Meeting and Exposition, Virtual Meeting, julho 2021. **Comunicação Oral.**

93. Vitorino, C., *Surface-functionalized lipid nanoparticles for glioblastoma treatment* Controlled Release Society, Annual Meeting and Exposition, Virtual Meeting, julho 2021. **Comunicação Oral.**

94. Vitorino, C., *Design of bioconjugated lipid nanoconstructs to act site-specifically towards glioblastoma growth impairment*, The 2021 International Symposium on Biomedical Engineering and Computational Biology (BECB 2021), BECB-MS-1025, Agosto 2021. **Lição convidada.**

95. Vitorino, C., *Solid lipid nanoparticles for transdermal drug delivery: where are we?*, 1st Symposium on Advanced Technologies for Drug Delivery, Faculdade de Farmácia, Universidade de Lisboa, October 2021. **Comunicação Oral.**

96. Vitorino, C., *Lipid nanoparticles for drug targeting to the brain*, Advanced Drug Delivery 2021 Doctoral Program, Faculdade de Farmácia, Universidade de Lisboa, March 2021. **Comunicação Oral.**

97. Vitorino, C., *On demand for new process analytical technologies applied to injectable drug products*, PAT&QbD, CPhi Conferences, Informa Markets, 2021. **Comunicação Oral.**

98. Vitorino, C., *Lipid nanoparticle functionalization for brain drug targeting*, IV Workshop Maestría en Biotecnología, Univerisad de Santander, UDES, Colômbia, julho 2021. **Comunicação Oral.**

99. Veloso, C., Cardoso, C., Vitorino, C., *Preclinical development of a fixed-dose combination medicinal product for topical administration – Current in vitro and in vivo methodologies* 3rd SPLC-CRS Young Scientist Virtual Meeting, January 2021. **Poster.**

100. Henriques, J., Schaberle, F. A., Serpa, C., Cardoso, C., Vitorino, C., *A new photoacoustic spectroscopy method for salt assay in solution: paving the way towards a Process Analytical Technology*, 3rd SPLC-CRS Young Scientist, Virtual Meeting, January 2021. **Poster.**
101. Simões, A., Veiga, F., Vitorino, C., *Understanding cream formulation: a QbD approach*, 3rd SPLC-CRS Young Scientist, Virtual Meeting, January 2021. **Poster.**
102. Basso, J., Mendes, M., Silva, J., Cova, T., Luque-Michel, E., Jorge, A. F., Grijalvo, S., Gonçalves, L., Eritja, R., Blanco-Prieto, M. J., Almeida, A. J., Pais, A., Vitorino, C., *Machine learning for establishing the bridge between formulation design and performance in glioblastoma*, 3rd SPLC-CRS Young Scientist, Virtual Meeting, January 2021. **Poster.**
103. Brites, G., Ferreira, I., Silva, A., Carrascal, M., Vitorino, C., Neves, B., Cruz, M. T., *Avoiding contact allergens: from basic research to development of a new medical device*, EUROTOX 2020 Congress, Virtual Congress, September 2021. **Poster.**
104. Chierentin, L., Cardoso, C., Vitorino, C., *A design of experiments (DoE) applied in analytical method*, Anais do II Congresso de Ciências Aplicadas à Farmácia – CONCAF, setembro 2021. **Poster.**
105. Basso, J., Ramos, M. L., Pais, A., Vitorino, R., Fortuna, A., Vitorino, C., *Expediting Disulfiram Assays through a Systematic Analytical Quality by Design Approach*, EUPAT 10, Eufeps, Tenth Anniversary pan-European Science Conference on QbD & PAT, October 2021. **Poster.**
106. Brites, G., Ferreira, I., Silva, A., Carrascal, M., Vitorino, C., Neves, B., Cruz, M. T., *Prevention of allergic contact dermatitis, myth or reality? Avoiding contact allergens: from basic research to development of a new medical device*, Toxicology Letters 350S, 2021. **Poster.**
107. Moreno, M. J., *Association of Amphiphiles with Biomembranes – Hydrophobicity is just the beginning*, Seminaire-au-fil-de-leau, University of Brest, Brest, France, October 2021. **Lição convidada**
108. Salvador, A., *A quantitative perspective on H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> signaling in human cells*. Annual Meeting of the Society for Mathematical Biology, 13-17 June 2021, online **Comunicação oral convidada**
109. Oliveira, A., Filipe, H. A. L., Salvador, A., Geraldes, C. F. G. C., Moreno, M. J., Loura, L. M. S., *Modelling Gd-DOTA for molecular dynamics simulations in water and in presence of lipid bilayers*, 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress (7IIBC), Coimbra, Portugal, 14-16 June 2021. **Comunicação oral**
110. Machado, F., Vaz, I., Moreno, M. J., Nunes, C., Coimbra, M. A., Coreta-Gomes, F. M. *Hypocholesterolemic potential of food ingredients: from structure to function*, XV EQA Química dos Alimentos, Madeira, 5-8 September 2021. **Comunicação oral**
111. Orvalho, T., Vaz, D. C., Ribeiro, V., Campos, M. J., *Storage Procedures Influence the Antioxidant Capacity of Bee Pollen*. 1st International Conference on Water Energy Food and Sustainability. ICOWEFS 2021, Leiria, Portugal, 2021. **Comunicação oral**

112. Parracho, T., Vaz, D. C., Veríssimo, P., Ribeiro, V., *Sand-Dune Plants from the Atlantic Coast of the Iberian Peninsula: Features and Applications*. 1st International Conference on Water Energy Food and Sustainability. ICoWEFS 2021, Leiria, Portugal, 2021. **Comunicação oral**

113. Ratnakar, J., Chirayil, S., Funk, A. M., Zhang, S., Queiró, J. F., Geraldes, C. F. G. C., Kovacs, Z., Sherry, A. D., *An Yb<sup>3+</sup>- DO3P tris(phosphonate) complex as a pH-responsive paraCEST agent for MRI*, 9<sup>th</sup> Ibero-American NMR Meeting (on line), April 26-29, 2021. **Comunicação oral**

114. Sousa, T., Travasso, R., Salvador, A., *How far can hydrogen peroxide travel in microcirculation?* Meeting of the European Society for Clinical Investigation 2021, 9-11 June 2021, Bari (Italy). **Comunicação oral**

115. Sousa, T., Travasso, R., Salvador, A., *How far can hydrogen peroxide travel in microcirculation?* Annual Meeting of the Society for Mathematical Biology, 13-17 June 2021, online **Comunicação oral**

116. Almeida, Z. L., Simões, C. J. V., Brito, R. M. M., *FIBREAKERS: Searching for the Rules and Selection Criteria for Drug-Like Compounds that Break Amyloid Fibrils*, 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress (7IIBC) (Virtual Meeting), Coimbra, Portugal, 14-16 June 2021. **Poster**

117. Brás, J. R. M., Oliveira, A. C., Castro, M., Geraldes, C. F. G. C., Piñeiro, M., Moreno, M. J., *Synthesis of Lipophilic Gd-DOTA derivatives for use as Contrast Agents in MRI - Characterization of their Interaction with POPC Bilayers*, 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress (7IIBC) (Virtual Meeting), Coimbra, Portugal, 14-16 June 2021. **Poster**

118. Caniceiro, A. B., Cruz, P. F., Almeida, Z. L., Brito, Rui M. M., *The importance of fluorine in drug design: binding of fluorinated ligands to Transthyretin as a test case*, 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress (7IIBC) (Virtual Meeting), Coimbra, Portugal, 14-16 June 2021. **Poster**

119. Cordeiro, M. M., Salvador, A., Moreno, M. J., *Permeation of weak acids and bases through lipid bilayers – modelling and validation of a pH variation assay*, 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress (7IIBC) (Virtual Meeting), Coimbra, Portugal, 14-16 June 2021. **Poster**

120. Cunha, S. V., Filipe, H. L., Ramos, C. V., Martins, P. A., Abel, B., Ambudkar, S. V., Loura, L. M., Moreno, M. J., *Interaction of a Homologous Series of Amphiphiles with P-Glycoprotein Containing Membranes*, 65th Annual Meeting of the Biophysical Society (online), 22-26 February 2021. **Poster**  
DOI: 10.1016/j.bpj.2020.11.508

121. Domingues, V., Ferreira, M., Almeida, Z. C., Barbosa de Melo, J., Pereira, S., Vaz, D. C., *Structural Features of Bread Gluten and Alpha-Gliadin: Implications for Celiac Disease*. 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress (7IIBC) (Virtual Meeting), Coimbra, Portugal, 14-16 June 2021, 2021. **Poster**

122. Ferreira, N. R., Guimarães, V., Costa, V. S., Moreira, I. S., *Boosting network biology using a cutting-edge text-mining approach*. Network Biology, Virtual Meeting, 2021. **Poster**.

123. Geraldés, C. F. G. C., Ratnakar, J., Chirayil, S., Funk, A. M., Zhang, S., Queiró, J. F., Kovacs, Z., Sherry, A. D., *An Yb<sup>3+</sup>- DO3P tris(phosphonate) complex as a pH-responsive paraCEST agent for MRI*, 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress (7IIBC) (Virtual Meeting), Coimbra, Portugal, 14-16 June 2021. **Poster**

124. Gonçalves, A., Henriques, D., Ramalho, J., Araújo, S., Rodrigues, T., Silva, C.G., Pinto, C., Franco, D., *Saúde Vocal a Marchar*, 2nd International Congress of Health and Well-being Intervention, ID: 91, 2021, Instituto Piaget, Campus de Viseu. **Poster**

125. Loureiro, E. M. F. C., Cordeiro, M. M., Moreno, M. J., *Preparation of Large Unilamellar Vesicles with encapsulated protein – comparison of different methodologies*, 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress (7IIBC) (Virtual Meeting), Coimbra, Portugal, 14-16 June 2021. **Poster**

126. Loureiro, R. J., Cunha, A., Brito, R. M. M., *Non-structural protein 1 (NS1) interaction with PI3K as a target for influenza antiviral therapy*, 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress (7IIBC) (Virtual Meeting), Coimbra, Portugal, 14-16 June 2021. **Poster**

127. Loureiro, R. J., Cunha, A., Brito, R. M. M., *Non-structural protein 1 (NS1) interaction with PI3K as a target for influenza antiviral therapy*, EMBO Workshop on Advances and Challenges in Biomolecular Simulations, (Virtual Meeting), 2021. **Poster**

128. Machado, F., Lopes, G., Moreno, M. J., Coimbra, M. A., Coreta-Gomes, F., *Hypocholesterolemic potential of coffee polysaccharides: dependence on processing parameters*, 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress (7IIBC) (Virtual Meeting), Coimbra, Portugal, 14-16 June 2021. **Poster**

129. Machado, F., Moreno, M. J., Coimbra, M. A., Coreta-Gomes, F., *Evaluation of Hypocholesterolemic Potential of Galactomannans and Arabinogalactans: Influence of Coffee Processing Parameters*, 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress (7IIBC) (Virtual Meeting), Coimbra, Portugal, 14-16 June 2021. **Poster**

130. Machado, F., Coimbra, M. A., Coreta-Gomes, F., *Coffee: Is it possible to improve its potential to decrease cholesterol?*, Dare2Change, Innovation-Driven Agrifood Business, Centro de Congressos do Super Bock Arena, Porto, 18 - 19 November 2021, **Poster**

131. Marques-Pereira, C., Pires, M. N., Gouveia, R. P., Pereira, N. N., Caniceiro, A. B., Rosário-Ferreira, R., Moreira, I. S., *SARS-CoV-2 membrane protein: from genomic data to structural new insights*. Congress of Microbiology and Biotechnology (MicroBiotec), 2021. Webconference. **Poster**

132. Martins, J., Loura, L. M. S., do Canto, A. M. T. M., *Concentration effects of py10-PC in fluid POPC bilayers: combined fluorescence and molecular dynamics studies*, 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress (7IIBC) (Virtual Meeting), Coimbra, Portugal, 14-16 June 2021. **Poster**

133. Metelo, A. M., Arias-Ramos, N., Pérez-Carro, R., Lopez-Larrubia, P., Castro, M. M. C. A., *In vivo and ex vivo studies using NMR techniques to unveil the pharmacological properties of VO(dmpp)<sub>2</sub>*, 9<sup>th</sup> Iberoamerican NMR meeting, 26 -29 april 2021, online format. **Poster**

134. Metelo, A. M., Arias-Ramos, N., Pérez-Carro, R., Lopez-Larrubia, P., Castro, M. M. C. A., *The pharmacological properties of VO(dmpp)<sub>2</sub> as assessed by in vivo and ex vivo studies and NMR techniques*, 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress (7IIBC) (Virtual Meeting), Coimbra, Portugal, 14-16 June 2021. **Poster**
135. Pimenta, S., Flora, S., Silva, C.G., Oliveira, A., Morais, N., Ribeiro, J., Silva, F., Caceiro, R., Carreira, B.P., Januário, F., Andrade, L., Rodrigues, F., Brooks, D., Burtin, C., Marques, A., Cruz, J., *Motivation and physical activity in COPD: an exploratory study*, European Respiratory Journal, 58 (suppl 65): PA1816. ERS International Congress 2021 (Virtual Meeting), 2021. **Poster**  
DOI: 10.1183/13993003.congress-2021.PA1816
136. Pires, C. L., Praça, C., Martins, P. A. T., 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*, 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress (7IIBC) (Virtual Meeting), Coimbra, Portugal, 14-16 June 2021. **Poster**
137. Ramos, C. V., Abreu, R. C., Martins, P. A. T., Fernandes, H., Ferreira, L., Moreno, M. J., *Biophysical characterization of the mechanisms of transfection agents for the use of exosomes in gene therapy*, 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress (7IIBC) (Virtual Meeting), Coimbra, Portugal, 14-16 June 2021. **Poster**
138. Santos, R. M. S., Oliveira, A. C., Filipe, H. A. L., Moreno, M. J., Loura, L. M. S., *Interaction of the antibiotic Rifampicin with lipid membranes: molecular dynamics simulations*, 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress (7IIBC) (Virtual Meeting), Coimbra, Portugal, 14-16 June 2021. **Poster**
139. Silva, I. M. V., Nunes, C., Coimbra, M. A., Moreno, M. J., Coreta-Gomes, F., *Marine polysaccharides structural features and their influence on hypocholesterolemic function*, 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress (7IIBC) (Virtual Meeting), Coimbra, Portugal, 14-16 June 2021. **Poster**
140. Silva, J. M., Cerofolini, L., Geraldes, C. F. G. C., Carvalho, A. L., Ravera, E., Parigi, G., Luchinat, C., A. Macedo, A. L., *Paramagnetic Human Carbonic Anhydrase 2 - A closer look at the active site*, 9<sup>th</sup> Ibero-American NMR Meeting (on line), April 26-29, 2021. **Poster**
141. Silva, S. P., Coreta-Gomes, F. M., Coimbra, M. A., Coelho, E., *Pine nut skin valorization: towards a functional food ingredient*, XV EQA Química dos Alimentos, Madeira, 5-8 September 2021. **Poster**
142. Sousa, T., Travasso, R., Salvador, A., *How far can hydrogen peroxide travel in blood circulation?* 20th Biennial Meeting of the Society for Free Radical Research International, online. **Poster**
143. Vieira, A., Dias, D., Miguel, E., Matos, T., Flora, S., Silva, C.G., Morais, N., Oliveira, A., Caceiro, R., Silva, F., Ribeiro, J., Silva, S., Martins, V., Valente, C., Burtin, C., Brooks, D., Marques, A., Cruz, J., *Relationship between fatigue, physical activity and health-related factors in COPD*. European Respiratory Journal, 58 (suppl 65): PA336. ERS International Congress 2021 (Virtual Meeting), 2021. **Poster**  
DOI: 10.1183/13993003.congress-2021.PA336



## Lições Plenárias, Comunicações e Pósteres Apresentados em Reuniões Científicas Nacionais

1. Nogueira, B. A., Milani, A., Castiglioni, C., Fausto, R., *Polymorphism of 1-Methylhydantoin Investigation by Periodic DFT Calculations and Characterization of the Third Polymorph*, 7PhyChem – Portuguese Young Chemists Meeting, Bragança, 2021. **Invited Oral Presentation**
2. Nogueira, B. A., Milani, A., Castiglioni, C., Fausto, R., *LiNbO<sub>3</sub> Crystal as a Test Case for the Correlation Between Experimental and Theoretical Polarized Raman Spectra*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química-Física, Coimbra, 2021. **Poster**
3. Justino, L. L. G., Fausto, R., Burrows, H. D., Raposo, M. M. M., *DFT and TD-DFT Studies of Ground and Excited State Properties of Free and Adsorbed Terpyridine Dyes*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química-Física, Coimbra, 2021. **Poster**
4. Roque, J. P. L., Nunes, C. M., Viegas, L. P., Pereira, N. A. M., Pinho e Melo, T. M. D. V., Fausto, R., *H-Tunneling Activated by Vibrational Excitation*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química-Física, Coimbra, 2021. **Poster**
5. Nogueira, B. A., Milani, A., Castiglioni, C., Fausto, R., *Polymorphism of 1-Methylhydantoin by Periodic DFT Calculations and Characterization of the Third Polymorph*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química-Física, Coimbra, 2021. **Oral Presentation**
6. Reva, I., Lopes Jesus, A. J., Nunes, C. M., Roque, J. P. L., Fausto, R., *Photochemistry of Monomeric Benzoxazole and Isocyanophenol*, XVII Encontro Nacional de Química da SPQ, Braga, 2021. **Oral Presentation**
7. Justino, L. L. G., Ramos, M. L., Fonseca, S. M., Costa, T., Fausto, R., Burrows, H. D., *Structure, Properties and Applications of 8-Hydroxyquinoline-5-sulfonate Based Materials*, XXVII Encontro Nacional da SQP, Braga, 2021. **Invited Oral Presentation**
8. Braz, S., Justino, L. L. G., Ramos, M. L., Pina, J., Fausto, R., *Structural Characterization and Photophysical Studies of Ga(III) Alizarin Red S Complexes in Semi-Aqueous Solution. Potential for Applications in Sensing*, CQCDay – Dia do Centro de Química de Coimbra, Coimbra, 2021. **Poster**
9. Lopes, S., Nikitin, T., Fausto, R., *Photochemical Study and Vibrational Spectra of Propiolamide Isolated in Low-Temperature Inert Matrices*, CQCDay – Dia do Centro de Química de Coimbra, Coimbra, 2021. **Poster**
10. Nunes, C. M., Roque, J. P. L., Doddipatla, S., Wood, S. A., McMahon, R. J., Fausto, R., *Simultaneous Tunneling Control in Conformer Specific Reactions*, CQCDay – Dia do Centro de Química de Coimbra, Coimbra, 2021. **Poster**
11. Pereira, N. A. M., Nunes, C. M., Reva, I., Fausto, R., *Tautomerization of Thiotropolone Explored Under Different Conditions: Cryogenic Noble Gas Matrices and Neat Solid State*, CQCDay – Dia do Centro de Química de Coimbra, Coimbra, 2021. **Poster**

12. Fausto, R., *IR-Induced and Tunneling Reactions in Cryogenic Matrices: The (Incomplete) Story of a Successful Endeavor*, R. Fausto, CQCDay – Dia do Centro de Química de Coimbra, Coimbra, 2021. **Plenary Lecture**

13. Roque, J. P. L., Nunes, C. M., Viegas, L. P., Pereira, N. A. M., Pinho e Melo, T. M. D. V., Fausto, R., *H-Tunneling Activated by Vibrational Excitation*, 7PhyChem – Portuguese Young Chemists Meeting, Bragança, 2021. **Oral Presentation**

14. Roque, J. P. L., Nunes, C. M., Viegas, L. P., Pereira, N. A. M., Pinho e Melo, T. M. D. V., Schreiner, R. P., Fausto, R., *Activation of H-Tunneling by Vibrational Excitation*, CQCDay – Dia do Centro de Química de Coimbra, Coimbra, 2021. **Oral Presentation**

15. Nunes, C. M., *Molecular Manipulations under Cryogenic Conditions Controlled by Infrared Vibrational Excitation*, 14th Portuguese National Meeting of Physical Chemistry, Coimbra, Portugal, 2021. **Invited Keynote Lecture**

16. Santos, J. A., Baptista, J. A., Castro, R. A. E., Maria, T. M. R., Silva M. R., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., *Pharmaceutical nanococrystals synthesis: a novel mechanochemical approach*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química-Física da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2021. **Comunicação oral.**

17. Silva, J. F. C., Rosado, M. T. S., Silva, P. S. P., Silva, M. R., Eusébio, M. E. S., *Co-amorphous nateglinide systems: screening and thermal behavior evaluation*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química-Física da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2021. **Comunicação oral.**

18. Baptista, J. A., Rosado, M. T. S., Maria, T. M. R., Castro, R. A. E., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., *A preliminary investigation on the crystallization of pyrimethamine polymorphs from solutions*, CQCday 2021, Coimbra, 15 Dezembro 2021. **Comunicação em painel.**

19. Marques, A. M. L., Baptista, J. A., Castro, R. A. E., Maria, T. M. R., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., *Studies of Dual Drug Cocrystals: (1:1)-Diflunisal : Isoniazid and (1:1)-Lamotrigine : Ethosuximide*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química-Física da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2021. **Comunicação em painel.**

20. Silva, J. F. C., Rosado, M. T. S., Eusébio, M. E. S., *Understanding conformational preferences and molecular interactions in co-amorphous drug systems: lurasidone combined with saccharin or cysteine*. 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química-Física da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2021. **Comunicação em painel.**

21. Santos, J. A., Baptista, J. A., Castro, R. A. E., Maria, T. M. R., Silva, M. R., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., *Pharmaceutical Nanococrystal Synthesis: a novel grinding approach*, Digital Colloquium, Associação Nacional de Estudantes de Química, 2021. **Comunicação em painel.**

22. Silva, J. F. C., Rosado, M. T. S., Eusébio, M. E. S., *Molecular conformations and interactions in lurasidone co-amorphous drug systems*, Ciência 2021 - Encontro com a ciência e a tecnologia em Portugal, Lisboa, 2021. **Comunicação em painel.**

23. Arnaut, L. G., “*História breve da Química na Terra e do Homem que nela vive*”, VI Encontro Científico do NEQ/AAC, 19-20 de Março de 2021, Universidade de Coimbra, Coimbra. **Lição Plenária**

24. Aroso, R. T., Arnaut, Z. A., Pinto, S. M. A., Domingos, C. V., Silva, M. C., Dabrowski, J. M., Pucelik, B., Dubin, G., Arnaut, L. G., Calvete, M. J. F, Pereira, M. M., *Cationic imidazolyl-based photosensitizers with near-infrared absorption for inactivation of bacteria*, Coimbra Chemistry Centre Day, Coimbra, Portugal, 2021. **Poster**

25. Carrilho, R. M. B., Gonzalez, A. C. S., Aroso, R. T., Rodrigues, F. M. S., Pereira, M. M., *Catalytic Synthetic Approaches towards Photosensitive Bio-Polymers*, 4<sup>th</sup> International Symposium on Synthesis and Catalysis (ISySyCat2021), Évora, 2021. **Comunicação oral**

26. Costa, E., *Modelos in-vivo*, XIV Congresso Científico NEF/AAC, Coimbra, 2021. **Comunicação oral**

27. Carrilho, R. M. B., *Catalytic Activation of Small Gas Molecules: towards the Sustainable Synthesis of Value-added Products*, Coimbra Chemistry Centre Day, Coimbra, Portugal, 2021. **Comunicação oral convidada**

28. Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M., *Bioplásticos – em Busca de um Futuro Sustentável*, Universidade de Coimbra. **Comunicação oral convidada**

29. Duque-Prata, A., Iglesias, B. A., Serpa, C., *Through-Bond Intramolecular Excitation Energy Transfer In meso-Tetrapyrrenylporphyrins*, VI Encontro Científico do NEQ/AAC, 19-20 de Março de 2021, Universidade de Coimbra, Coimbra, online. **Comunicação Oral**

30. Duque-Prata, A., Pereira, D. A., Nogueira, B. A., *Escola Molecular: Uma Porta De Entrada Na Química*, IX Encontro da Divisão de Ensino e Divulgação da Química, 26-27 de Novembro de 2021, Cascais. **Comunicação Oral**

31. Duque-Prata, A., Serpa, C., Caridade, P. J. S. B., *How the structure of intermediate species influences selectivity in the photoreaction of 1-allyl-4-aryltetrazolones in solution*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Física, 29-31 de Março de 2021, online. **Comunicação Oral**

32. Duque-Prata, A., Serpa, C., Caridade, P. J. S. B., *Photochemistry of 1-phenyl-4-allyl-tetrazol-5-one: A theoretical study contribution towards mechanism elucidation*, Portuguese Young Chemists Meeting, 19-21 de Maio de 2021, online. **Poster**

33. Felgueiras, A. P., Rodrigues, F. M. S., Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M., *BINOL-Menthol Monophosphites: Sequential Hydroformylation Acetalization Catalytic Reactions Under Batch and Continuous Flow*, XI National Meeting on Catalysis and Porous Materials, online, Portugal, 2021. **Poster**

34. Gonzalez, A. C. S., Cruz, I. G., Aroso, R. T., Tavares, I., Rodrigues, F. M. S., Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M., *Sustainable Catalytic Processes for the Development of Photosensitive Polymeric Materials*, XI National Meeting on Catalysis and Porous Materials, online, Portugal, 2021. **Comunicação Oral**

35. Gonzalez, A. C. S., Cruz, I. G., Aroso, R. T., Tavares, I., Rodrigues, F. M. S., Carrilho, R. M. B., Pereira, M. M., *Photosensitive Polycarbonates for Antimicrobial Applications*, 6th CATSUS Workshop, online, 2021. **Comunicação oral**
36. Masliy, V., Rodrigues, F. M. S., Felgueiras, A. P., Silva, M. F. C., Carrilho, R. M. B., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., *Continuous-Flow Catalytic Strategies for Sustainable Synthesis of Fine Chemicals*, XI National Meeting on Catalysis and Porous Materials, online, Portugal, 2021. **Poster**
37. Mendes, M. I. P., Schaberle, F. A., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., Arnaut, L. G., *Porphyrim loaded nanodroplets for Photoacoustic Tomography*, Colóquio Digital de Estudantes de Química em Portugal, 26-28 Março 2021. **Comunicação Oral por videoconferência**
38. Pereira, D. A., Silva, A. D., Martins, P. A. T., Piedade, A. P., Martynowych, D., Veysset, D., Moreno, M. J., Serpa, C., Nelsen, K. A., Arnaut, L. G., *Permeabilization of Giant Unilamellar Vesicles with Photoacoustic Waves*. VI Encontro científico do NEQ/AAC, 19 e 20 março, Coimbra, Portugal. **Comunicação Oral**, prémio melhor comunicação oral.
39. Pereira, D. A., Silva, A. D., Martins, P. A. T., Piedade, A. P., Martynowych, D., Veysset, D., Moreno, M. J., Nelsen, K. A., Serpa, C., *Imaging of Photoacoustic-Mediated Permeabilization of Giant Unilamellar Vesicles (GUVs)*, Colóquio Digital de Estudantes de Química em Portugal, 26-28 Março 2021. **Comunicação Oral**
40. Pereira, D. A., Duque-Prata, A., Nogueira, B. A., *Podcast Molecular – Nos bastidores da Ciência*, IX Encontro da Divisão de Ensino e Divulgação da Química, 26 e 27 novembro 2021. Cascais, Portugal. **Comunicação oral**
41. Piccirillo, G., Maldonado-Carmona, N., Marques, D. L., Villandier, N., Leroy-Lhez, S., Eusébio, M. E. S., Pereira, M. M., Calvete, M. J. F., *Tetrapyrrolic macrocycles-based catalysts: alternative approaches for antibiotics degradation* XI National Meeting on Catalysis and Porous Materials & II Meeting of the Carbon Group, online, 2021. **Poster**
42. Piccirillo, G., Maldonado-Carmona, N., Marques, D. L., Villandier, N., Leroy-Lhez, S., Eusébio, M. E. S., Tomé, J. P. C., Pereira, M. M., Calvete, M. J. F., *Porphyrim encapsulated into natural biopolymer: a green photocatalyst for antibiotic degradation*, 6th CATSUS Workshop, online, 2021. **Comunicação oral**
43. Piccirillo, G., Moreira-Santos, M., Válega, M., Eusébio, M. E. S., Silva, A. M. S., Ribeiro, R., Freitas, H., Pereira, M. M., Calvete, M. J. F., *A sustainable approach to antibiotic decontamination using a manganese(III) porphyrim based heterogeneous catalyst*, 4<sup>th</sup> International Symposium on Synthesis and Catalysis (ISySyCat2021), Évora, 2021. **Comunicação oral**
44. Rodrigues, F. M. S., Piccirillo, G., Gonzalez, A. C. S., Aroso, R. T., Felgueiras, A. P., Marques, D. L., Masliy, V., Carrilho, R. M. B., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., *Development of Sustainable Processes Using Reusable Catalysts*, Coimbra Chemistry Centre Day, Coimbra, Portugal, 2021. **Poster**
45. Serpa, C, *From the Transfer of a Photon Momentum to Photomedicine*, Coimbra Chemistry Centre Day 2021, Departamento de Química, Universidade de Coimbra, Coimbra, Portugal, 15 December, 2021. **Apresentação Oral**

46. Serpa, C., *Laser Technology from Space into Beauty Salons*, 7th Aniversary, ESA Space Solutions Portugal, Instituto Pedro Nunes, Coimbra, Portugal, 24 November, 2021. **Apresentação Oral**
47. Serpa, C., *LaserLeap, a Medical Devices Company*, 4<sup>th</sup> Doctoral Congress in Engineering, Symposium on Biomedical Engineering, Faculty of Engineering of the University of Porto, Portugal, 29 June, 2021. **Apresentação Oral por videocnferência**
48. Serpa, C., *LaserLeap: da Investigação à Empresa*, Workshop *Empreendedorismo Académico*, Start-Up Leiria, I.P. Leiria, Portugal, 25 March, 2021. **Apresentação Oral por videocnferência**
49. Rodrigues, Sérgio P. J., *Passeios químicos: uma oportunidade pedagógica*. 14<sup>o</sup> encontro da divisão de química-física da SPQ. Coimbra, 29-31 de março de 2021. **Ação de Formação**.
50. Rodrigues, Sérgio P. J., *Towards a simpler relation of electronic structure with molecular properties: historical findings*. 14<sup>o</sup> encontro da divisão de química-física da SPQ. Coimbra, 29-31 de março de 2021. **Poster**
51. Garcia, Teresa M. O., Rodrigues, Sérgio P. J., *Basic education across Europe - A physical-chemical approach by the sea*. 14<sup>o</sup> encontro da divisão de química-física da SPQ. Coimbra, 29-31 de março de 2021. **Poster**
52. Rodrigues, Sérgio P. J., *Química e arte: o óbvio pode não ser trivial*. 9<sup>o</sup> Encontro da Divisão de Ensino e Divulgação da Química da SPQ. Cascais, 26-27 novembro de 2021. **Comunicação oral**
53. Pinho e Melo, T. M. V. D., *Organic Chemistry in the Discovery of New Drugs*, Coimbra Chemistry Centre Day 2021, Coimbra, 2021. **Lição Plenária Convidada**
54. Pineiro, M., Gomes, C., Nogueira, B. A., Lopes, S. M. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Paixão, J., Fausto, R., Martins, L. M. D. R. S., *All Mechanochemistry, from Ligand to Catalysts and Catalysis*, Coimbra Chemistry Centre Day 2021 (CQCday2021), Coimbra, 2021. **Comunicação Oral**
55. Roque, J. P. L., Nunes, C. M. N., Viegas, L. P., Pereira, N. A. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Schreiner, P. R., Fausto, R., *Activation of H-Tunneling by Vibrational Excitation*, Coimbra Chemistry Centre Day 2021 (CQCday2021), Coimbra, 2021. **Comunicação Oral**
56. Pina, J., Jerónimo, G. G., Pinho e Melo, T. M. V. D., Pineiro, M., *TTA-UC Emitter based on NIR Excitable Aggregated Pt(II) Chlorin Immobilized with Tetraphenylethylene in Cellulose Acetate Films*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química-Física, formato digital, 2021. **Poster**
57. Santos, P. P., Vaz, P. G., Gaudêncio, A. S. F., Morgado, M., Pereira, N. A. M., Pineiro, M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Cardoso, J., *Compressive Single Pixel Phosphorescence Lifetime and Intensity Simultaneous Imaging: a Pilot Study using Oxygen Sensitive Biomarkers*, SPIE Optics + Optoelectronics, formato digital, 2021. **Poster**
58. Alves, C. C., Cardoso, A. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Novel Catalysts for the Asymmetric Neber Reaction: Synthesis of Chiral 2-(Tetrazol-5-yl)-2H-Azirines*, 7th Portuguese Young Chemists Meeting (7PYCHEM), Bragança, 2021. **Poster**

59. Ribeiro, J., Lopes, S. M. M., Saraiva, L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Synthesis and Anticancer Activity of 3-Tetrazolyl- and 3-Triazolyl- $\beta$ -carboline against Human Colon Cancer Cell Lines*, 7th Portuguese Young Chemists Meeting (7PYCHEM), Bragança, 2021. **Poster**
60. Alves, A. J. S., Alves, N. G., Laranjo, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Chiral  $\alpha$ -Alkylidene-Substituted  $\beta$ -Lactams and  $\gamma$ -Lactams: Synthesis and Anticancer Activity*, XXI SPB National Congress of Biochemistry, Évora, 2021. **Poster**
61. Alves, A. J. S., Bártolo, I., Taveira, N., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Synthesis and Anti-HIV Evaluation of New Chiral Spiro- $\beta$ -Lactams*, Coimbra Chemistry Centre Day 2021 (CQCday2021), Coimbra, 2021. **Poster**
62. Cardoso, A. L., Paixão, J. A., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Bis-Furans: a Sustainable Source of Diverse Molecular Entities*, Coimbra Chemistry Centre Day 2021 (CQCday2021), Coimbra, 2021. **Poster**
63. Costa, B. D. P., Braz, J., Lopes, S. M. M., Laranjo, M., Rodrigues, A. C., Pineiro, Seixas de Melo, J. S., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Corroles & Hydrazones: Two Allies in the Fight Against Lung Cancer*, Coimbra Chemistry Centre Day 2021 (CQCday2021), Coimbra, 2021. **Poster**
64. Grosso, C., Cardoso, A. L., Lemos, A., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Synthesis of Novel Indoles and Bis(indolyl)methanes: Approaches to Structures with Biological Activity*, Coimbra Chemistry Centre Day 2021 (CQCday2021), Coimbra, 2021. **Poster**
65. Alves, C. C., Gadelho, C. P., Cardoso, A. L., Murtinho, D. M. B., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Organocatalysts for the Asymmetric Neber Reaction of 2-(Tetrazol-5-yl)-2H-Azirines*, Coimbra Chemistry Centre Day 2021 (CQCday2021), Coimbra, 2021. **Poster**
66. Soares, M. I. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Lewis Base-Dependent [3+2] or [3+3] Annulation Reactions of Allenolates and 3-Nitro-2H-chromenes: Synthesis of Chromene-Fused Derivatives*, Coimbra Chemistry Centre Day 2021 (CQCday2021), Coimbra, 2021. **Poster**
67. Braz, J., Costa, B. D. P., Lopes, S. M. M., Laranjo, M., Pineiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Synthesis and Photodynamic Activity against Lung Cancer Cells of trans-A2B-Corroles Containing an Oxime Moiety*, Coimbra Chemistry Centre Day 2021 (CQCday2021), Coimbra, 2021. **Poster**
68. Ribeiro, J. L. P., Lopes, S. M. M., Saraiva, L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *3-Tetrazolyl- and 3-triazolyl- $\beta$ -carboline: Synthesis and Anticancer Activity against Human Colon Cancer Cell Lines*, Coimbra Chemistry Centre Day 2021 (CQCday2021), Coimbra, 2021. **Poster**
69. Hendrikx, M. M., Ribeiro, J. L. P., Soares, M. I. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Chiral 6,7-Bis(hydroxymethyl)-1H,3H-pyrrolo[1,2-c]thiazoles: Improving Colorectal Cancer Therapy with New p53-Activating Agents*, Coimbra Chemistry Centre Day 2021 (CQCday2021), Coimbra, 2021. **Poster**
70. Lopes, S. M. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Exploring 16-DPA Reactivity: Synthesis of New Chiral Steroids*, Coimbra Chemistry Centre Day 2021 (CQCday2021), Coimbra, 2021. **Poster**

71. Ferreira, A. C. S., Carta, A. M. S., Bértolo, R., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Enhancement of Absorption Capacity in Tissue Papers*, XXV TECNICELPA / XI CIADICYP Conference, formato digital, 2021. **Poster**

72. Machado T. F., Serra, M. E. S., Murtinho, D., Valente, A. J. M.,  *$\beta$ -Ketoenamine Covalent Organic Frameworks - Effects of Functionalization on Dye Adsorption and Heterogeneous Henry catalysis*, XI National Meeting on Catalysis and Porous Materials & II Meeting of the Carbon Group, formato digital, 2021. **Poster**

73. Matias, P. M. C., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Synthesis of a Porous Organic Polymer for Application in Henry Reactions and as Copper(II) adsorbent*, XI National Meeting on Catalysis and Porous Materials & II Meeting of the Carbon Group, formato digital, 2021. **Poster**

74. Machado, T. F., Serra, M. E. S., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Azo-Coupled Covalent Organic Framework for Application in Heterogeneous Henry Catalysis*, Coimbra Chemistry Centre Day, Coimbra, 2021. **Poster**

75. Sharma, M., Murtinho, D., Valente, A. J. M., Mendes de Sousa, A. P., Ferreira, P. J. T., *Effect of Enzymatic Pretreatment on Starch Cationization*, XXV TECNICELPA / XI CIADICYP Conference, 2021. **Comunicação Oral**

76. Aguado, R., Gramacho, S., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Headspace-solid Phase Microextraction for the Evaluation of Paper as Eucalyptus Essential Oil Carrier*, XXV TECNICELPA / XI CIADICYP Conference, 2021. **Comunicação Oral**

77. Tavares, N. C. T., Murtinho, D., Serra, E., *Thiazolidine-Based Ligands in Asymmetric Transformations*, 6th CATSUS Workshop, formato digital, 2021. **Comunicação Oral**

78. Rénio, M., Murtinho, D., Ventura, M. R., *Thioureas for Stereoselective Glycosylation Reactions*, 6th CATSUS Workshop, formato digital, 2021. **Comunicação Oral**

79. Lopes, S. M. M., *Synthesis of Novel Chiral Penta- and Hexacyclic Steroids*, Susana M. M. Lopes, XXVII Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química (ENSPQ), Braga, 2021. **Comunicação Oral Convidada.**

80. Brandão, P., Kuznetsov, M., Burke, A. J., Pineiro, M., *Multicomponent Reactions (MCRs): a Sustainable Strategy in Drug Discovery*, 6th CATSUS Workshop, formato digital, 2021. **Comunicação Oral**

81. Gomes, C., Royo, B., Martins, L. M. D. R. S., Pineiro, M., *Sustainable Approaches for the Synthesis of N-Heterocyclic Ligands, Synthesis of Organometallic Complexes and Catalytic Evaluation*, 6th CATSUS Workshop, formato digital, 2021. **Comunicação Oral**

82. Brandão, P., López, Ó., Burke, A. J., Pineiro, M., *One-step Multicomponent Reaction Synthesis of Oxindole-lactam Hybrids – New Agents Targeting Cholinesterase Inhibition*, (7PYCHEM), Bragança, 2021. **Poster**

83. Brandão, P., López, Ó., Burke, A. J., Pineiro, M., *Druglike Oxindole-lactam Hybrids as Selective Butyrylcholinesterase Inhibitors*, Young Medicinal Chemists' Symposium, EFMC-YMCS, format digital, 2021. **Poster**
84. Brandão, P., Marques, C. S., Kuznetsov, M., Burke, A. J., Pineiro, M., *Sustainability Meets Structural Diversity: Isatin-Based Multicomponent Reactions (MCRs)*, Coimbra Chemistry Centre, (CQCday2021), Coimbra, 2021. **Poster**
85. Peixoto, M., Rodrigues, A. C. B., Gomes, C., Pineiro, M., Seixas de Melo J. S., *Fluorene Reactivity: the Search for New Chromophores*, Coimbra Chemistry Centre, (CQCday2021), Coimbra, 2021. **Poster**
86. Santos, J. R. C., Abreu, P. E., Marques, J. M. C., *On the calculation of diffusion coefficients of pesticides by employing molecular dynamics simulations*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Física da Sociedade Portuguesa de Química, online, 2021. **Poster**
87. Jesus, W. S., Prudente, F. V., Marques, J. M. C., Pereira, F. B., *Assessing the DFT low-energy landscapes of  $Li^+K_n$  clusters by employing machine learning techniques*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Física da Sociedade Portuguesa de Química, online, 2021. **Poster**
88. Santos, J. R. C., Abreu, P. E., Marques, J. M. C., *On the calculation of diffusion coefficients of pesticides by employing molecular dynamics simulations*, Coimbra Chemistry Centre Day, Coimbra, 2021. **Poster**
89. Marques, J. M. C., *State of the art methods to discover low-energy chemical structures: from atomic clusters to microsolvation*, Coimbra Chemistry Centre Day, Coimbra, 2021. **Poster**
90. Fangaia, S. I. G., Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., Esteso, M. A., Guerra, F. A. D. R. A., Nicolau, P. M. G., *Comportamento de iões metálicos cromo e cobalto- coeficientes de difusão mútua*, XLI Congresso Anual da Sociedade Portuguesa de Estomatologia e Medicina Dentária (SPEMD2021), Lisboa, Portugal, Outubro 2021. **Comunicação oral (on line)**
91. Lobo, V. M. M., Fangaia, S. I. G., Nicolau, P. M. G., Guerra, F. A. D. R. A., Rodrigo, M. M., Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., Esteso, M. A., *Diffusion behaviour of aluminium and vanadium metal ions present in dental prosthesis, in different environments*, XXIV Meeting of the Portuguese Electrochemical Society (SPE2021), Tomar, Portugal, Outubro 2021. **Poster (on line)**
92. Esteso, M. A., *Electrolyte + non-electrolyte mixed systems: potentiometric determination of their activity coefficients*, XXIV Meeting of the Portuguese Electrochemical Society, Tomar, Portugal, Outubro 2021. **Lição Plenária (streaming)**
93. Ferreira, A. C. S., Carta, A. M. M. S., Bértolo, R., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Effect of poly(vinyl alcohol) on the water sorption and kinetics of tissue paper*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química-Física, Coimbra (online), 2021. **Poster**
94. Vareda, J. P., Matos, P. D., Valente, A. J. M., Durães, L., *Nickel separation via adsorption by an ORMOSIL aerogel modified with a Schiff base*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química-Física, Coimbra (online), 2021. **Poster**



95. Moço, G., Cabral, A. M. T. D.P. V., Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., Abreu, P. E., Santos, J. R. C., Marques, J. M. C., Rodrigo, M. M., Estes, M. A., *Effect of sodium chloride on the behavior of the lactose in aqueous solution studied from diffusion experiments and molecular dynamics simulations*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química-Física, Coimbra (online), 2021. **Poster**
96. Fernandes, C., Melro, E., Magalhães, S., Alves, L., Craveiro, R., Filipe, A., Valente, A.J.M., Martins, G., Antunes, F.E., Romano, A., Medronho, B., *New deep eutectic solvent assisted extraction of highly pure lignin from maritime pine sawdust (Pinus pinaster Ait.)*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química-Física, Coimbra (online), 2021. **Poster**
97. Gomes, B. O., Aguado, R., Valente, A. J. M., *Luminescent aqueous inks and coating formulations with RGB-tunable emission*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química-Física, Coimbra (online), 2021. **Prémio do 2<sup>o</sup> Melhor Poster**
98. Sousa, J. F. M., Pina, J., Pineiro, M., Gomes, C., Dias, L. D., Calvete, M. J. F., Murtinho, D., Seixas de Melo J.S., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M., *Incorporation of porphyrins into SPEEK membranes: synthesis and characterization*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química-Física, Coimbra (online), 2021. **Poster**
99. Valente, A. J. M., Murtinho, D., Carta, A. M. S., Bértolo, R., Ferreira, A. C. S., *Influence of DNA in pulp water absorption capacity*. XXVII Encontro Nacional da SPQ, Braga, 2021. **Poster**
100. Aguado, R., Gomes, B. O., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Luminescent aqueous dispersions of lanthanide ions and gum arabic for coatings*. XXVII Encontro Nacional da SPQ, Braga, 2021. **Poster**
101. Sharma, M., Aguado, R., Valente, A. J. M., Murtinho, D., Ferreira, P. J. T, *Dynamic penetration profile of starch betainate, Pluronic and PCC coated papers*. 1st FibEnTech International Congress, Online Conference, UBI, Portugal, 2021. **Poster**
102. Braz, S., Justino, L. L. G., Ramos, M. L., Pina, J., Fausto, R., “Structural Characterization of Ga(III) Alizarin Red S Complexes in Semi-Aqueous Solution. Potential for Applications in Sensing”, CQC Day, 2021. **Poster**
103. Basso, J., Ramos, M. L., Pais, A., Vitorino, R., Fortuna, A., Vitorino, C., “Accelerating Disulfiram Assays using Analytical Quality by Design”, CQC Day, 2021, **Poster**
104. Utzeri, G., Verissimo, L., Murtinho, D., Pais, A. A. C. C., Perrin, F. X., Ziarelli, F., Iordache, T. V., Sarbu, A., Valente, A. J. M., *Imidacloprid and cymoxanil removal by mesoporous poly( $\beta$ -cyclodextrin)-based composites*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química-Física, Coimbra (online), 2021. **Comunicação oral**
105. Aguado, R., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Release kinetics of monophenols from polysaccharides crosslinked with  $\beta$ -cyclodextrin*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química-Física, Coimbra (online), 2021. **Comunicação oral**
106. Melro, E., Valente, A. J. M., Antunes, F. E., Romano, A., Medronho, B., *Enhancing lignin dissolution and extraction: The effect of surfactants*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química-Física, Coimbra (online), 2021. **Comunicação oral**

107. Utzeri, G., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Heptakis-aminocyclodextrin nanosponges for imidacloprid removal in aqueous media*. XXVII Encontro Nacional da SPQ, Braga, 2021. **Comunicação oral**

108. Santos, M. G., Carmo, C., Araújo, J., Cruz, A., Botelho, M. F., Laranjo, M., Sobral, A. J. F. N., *Synthesis of New BODIPYs for PET Diagnosis*, 14 ENQF – 14º Encontro Nacional de Química-Física & 3º Simpósio de Química Computacional, Universidade de Coimbra, 29-31 de Março de 2021. **Poster**

109. Pinheiro, D., Sousa, J. F. M., Pineiro, M., Valente, A. J. M., Seixas de Melo, J. S., *Sulfonated Poly(Ether Ether Ketone) Membrane as Alternative for Nafion in Aqueous Organic Redox Flow Batteries*, Coimbra Chemistry Centre Day (CQCDay), Universidade de Coimbra, Coimbra, 2021. **Poster**

110. Ferreira, S. C. R., Pais, A. A. C., Seixas de Melo, J. S., *Chemistry of the first portuguese postage stamps*, Coimbra Chemistry Centre Day (CQCDay), Universidade de Coimbra, Coimbra, 2021. **Poster**

111. Rodrigues, A. C. B., Peixoto, M., Gomes, C., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *Aggregation Induced Emission Leading to White Light Emission*, Coimbra Chemistry Center Day, Universidade de Coimbra, Coimbra, 2021. **Comunicação Oral**.

112. Peixoto, M., Rodrigues, A. C. B., Gomes, C., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *Fluorene reactivity: the search for new chromophores*, Coimbra Chemistry Center Day, Universidade de Coimbra, Coimbra, 2021. **Poster**.

113. Pinheiro, D., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *Redox flow batteries with tryptanthrin sulfonic acid*, Solar Power Technologies Conference – Universidade do Porto, Porto, 2021. **Poster**

114. Pinheiro, D., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *All organic redox flow batteries with tryptanthrin sulfonic acid*, 14º Encontro Nacional de Química Física – Universidade de Coimbra, Coimbra, 2021. **Comunicação oral**

115. Nobre, D. C., Galvão, A., Seixas de Melo, J. S., *Photophysics and Photochemistry in N,N'-disubstituted indigo derivatives: Competition between ESPT and photoisomerization foi submetida*, 14º Encontro Nacional de Química Física, Universidade de Coimbra Coimbra, 2021. **Comunicação oral**

116. Rodrigues, A. C. B., Wetterlig, D., Scherf, U., Seixas de Melo, J. S., *Tuning J-aggregate formation and emission efficiency in cationic diazapentacenium dyes*, 14º Encontro de Química Física – Universidade de Coimbra, 2021. **Comunicação Oral**.

117. Delgado-Pinar, E., Pont Niclòs, I., García-España, E., Seixas de Melo, J. S., *Aggregation Induced Emission from the interaction of polyamines with Cucurbiturils*, 14º Encontro Nacional de Química Física – Universidade de Coimbra, Coimbra, 2021. **Comunicação oral**

118. Gonçalves, R. C. R., Pina, J., Costa, S. P. G., Raposo, M. M. M., *Synthesis and characterization of aryl-substituted BODIPY dyes displaying distinct solvatochromic singlet oxygen photosensitization efficiencies*, Iberian Symposium of Young Photochemists (ISYP), Royal Spanish Chemical Society, 2021. **Poster.**
119. Pinto, S., Gonçalves, R. C. R., Pina, J., Costa, S. P. G., Raposo, M. M. M., *Synthesis and photophysical characterization of BODIPY dyes*, Iberian Symposium of Young Photochemists (ISYP), Royal Spanish Chemical Society, 2021. **Poster.**
120. Seixas de Melo, J. S., *Molecules at the Museum*, XXVII Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Portugal, 2021. **Palestra**
121. Seixas de Melo, J. S., *Photophysics and Photochemistry in Molecules*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química-Física, Universidade de Coimbra (Coimbra). **Lição Plenária**
122. Assis, S., Cova, T. F., Nunes, S. C. C., Pais, A. A. C. C., *Characterizing psychoactive drugs by mining data from chemical databases and molecular simulations*, 14ENQF - 14 Encontro Nacional de Química Física, Coimbra, 2021. **Comunicação oral**
123. Cova, T., Nunes, S., Vitorino, C., Pais, A., *Computational modeling of drug recognition by cyclodextrin-based complexes*, 14ENQF - 14 Encontro Nacional de Química Física, Coimbra, 2021. **Poster**
124. Vitorino, C., *Nanotechnological approaches in cancer: repurposing drugs, Nanoparticles for drug repurposing in oncology and COVID-19 course*, Faculdade de Medicina, Universidade do Porto, Portugal, September 2021. **Comunicação Oral.**
125. Vitorino, C., *Formular para contornar a barreira cutânea*, WEBINARS da Parte 2 do Curso Pós-Graduado de Atualização em Cosmetologia, June 2021. **Comunicação Oral.**
126. Vitorino, C., *Nanopartículas lipídicas de superfície funcionalizada para o tratamento do glioblastoma*, Curso avançado: Bionanossistemas para aplicações farmacêuticas e cosméticas, CF-UM-UP, Departamento de Física da Universidade do Minho, Braga, Junho 2021. **Comunicação Oral.**
127. Veloso, C., Cardoso, C., Vitorino, C., *Can we improve pain management with topical fixed-dose combinations? Flash talk Sunset Skin Summit*, setembro 2021. **Comunicação Oral.**
128. Brites, G., Ferreira, I., Silva, A., Vitorino, C., Neves, B., Cruz, M. T., *A new hydrogel formulation enriched in molecules able to prevent allergic contact dermatitis: in vivo proof-of-concept*, Flash talk Sunset Skin Summit, Setembro 2021. **Comunicação Oral.**
129. Basso, J., Ramos, M. L., Pais, A., Vitorino, R., Fortuna, A., Vitorino, C., *Accelerating Disulfiram Assays using Analytical Quality by Design*, Coimbra Chemistry Centre Day 2021, Coimbra, Portugal, December 2021. **Poster.**
130. Mendes, M., Gomes-da-Silva, L., Arnaut, L., Vale, N., Sousa, J. J., Pais, A., Vitorino, C., *CPPs for rerouting nanoparticles in glioblastoma treatment*, Coimbra Chemistry Centre Day 2021, Coimbra, Portugal, December 2021, **Poster.**

131. Figueiredo, N. M., Veloso, I. G., Marques, J. M. C., Cordeiro, M. N. D. S., *New set-up force field for magnetic-ionic liquids*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Física da Sociedade Portuguesa de Química, online, 2021. **Comunicação oral**
132. Correia, C. F. O., Maçôas, E., Martinho, J. G. M., Marques, J. M. C., *Bottom-up carbon dots: sensing and imaging*, 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Física da Sociedade Portuguesa de Química, online, 2021. **Poster**
133. Campos, M. G., Anjos, O., Louraouine, E. M., *Globalization of Beehive Products in Food & Health. Natural products application: Health, Cosmetic and Food*, Bragança, Portugal, 2021. **Online Comunicação Oral Plenária e por convite.**
134. Campos M. G., *Interactions. The studies made by Observatory of Drug-Herb Interaction*, (OIPM.UC). European Agency of Medicines. INfarmed. Portugal, 18th March 2021 On-line **Lição convidada**
135. Campos M. G., *Canabis*, In4Med, Convento de São Francisco. Coimbra, 11. Abril, 2021. On-line **Convidada**
136. Salvador, A., *Gaining insight on H2O2 signaling through mathematical modeling*. XI Jornadas Nacionais de Ciências Biomédicas, 11-15 March, Covilhã (Portugal) (online) **Comunicação oral convidada**
137. Marques-Pereira, C., Pires, M. N., Gouveia, R. P., Pereira, N. N., Caniceiro, A. B., Rosário-Ferreira, R., Moreira, I. S., *SARS-CoV-2 membrane protein: from genomic data to structural new insights*. 10th Bioinformatic Open Days, Braga, 2021. **Comunicação Oral.**
138. Almeida, Z. L., Ferreira, E., Cruz, P. F., Simões, C. J. V., Brito, R. M. M., *Towards the design of drug-like compounds that break amyloid fibrils: Transthyretin, a case-study*, Symposium Coimbra Chemistry Centre Day 2021, Coimbra, Portugal, 2021. **Poster**
139. Birsanu, I, Correia, J., Reis, M., Flora, S., Marcelino, R., Diz, S., Mourinha, B., Silva, C. G., Barroso, M., Cruz, J., *Efeito de um programa de tiro com zarabatana na função respiratória de adultos com Dificuldades Intelectuais e Desenvolvimentais* (e-Poster 29), XI Congresso Nacional de Fisioterapeutas, Lisboa, 2021. **Poster**  
URL: <https://youtu.be/rDSkz76wrXk>
140. Cruz P. F., Pires, C. L, Moreno, M. J., Brito, R. M. M., Vaz, D. C., *A chemical walk into the wild Characterization of Edible Wild Plants by NMR spectroscopy*, Symposium Coimbra Chemistry Centre Day 2021, Coimbra, Portugal, 2021. **Poster**
141. Cunha, A. E. S, Loureiro, R. J., Simões, C. J. V., Brito, R. M. M., *Unveiling the “druggable” pockets of Non-Structural Protein 1 of Influenza A virus using Molecular Dynamics*, Symposium Coimbra Chemistry Center Day 2021, Coimbra, Portugal, 2021. **Poster**
142. Domingues, V., Barbosa de Melo, J., Pereira, S., Vaz, D. C., *Structural Features of Gliadin: Implications for Celiac Disease*. Symposium Coimbra Chemistry Center Day 2021, Coimbra, Portugal, 2021. **Poster**

143. Loureiro, R. J., Cunha, A., Brito, R. M. M., *Non-structural protein 1 (NS1) interaction with TRIM25 as a target for influenza antiviral therapy*, Symposium Coimbra Chemistry Center Day 2021, Coimbra, Portugal, 2021. **Poster**

144. Loureiro, R. J., Cunha, A., Brito, R. M. M., *Non-structural protein 1 (NS1) interaction with TRIM25 as a target for influenza antiviral therapy*, VIII Meeting of Young Researchers in Structural Computational Biology (EJIBCE), Coimbra, Portugal, 2021. **Poster**

145. Mata, A. I., Pereira, N. A. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Gomes-da-Silva, L. C., Simões, C. J. V., Brito, R. M. M., *Novel Photosensitisers for Targeted-Photodynamic Therapy*, Symposium Coimbra Chemistry Centre Day 2021, Coimbra, Portugal, 2021. **Poster**

146. Moreno, M. J., Salvador, A., Martins, J., Loura, L. M. S., *Equilibrium Constants and corresponding  $\Delta G^\circ$  in Heterogeneous Media*, 14<sup>o</sup> Encontro de Química-Física, Coimbra, Portugal, 29-31 March 2021. **Poster**

147. Oliveira, A. C., Filipe, H. A., Salvador, A., Sun, R., Voth, G. A., Geraldes, C. F. G. C., Moreno, M. J., Loura, L. M. S., *Modelling Gd-DOTA for molecular dynamics simulations in water and in presence of lipid bilayers*, Coimbra Chemistry Centre Day 2021. 15<sup>th</sup> December 2021. Coimbra, Portugal. **Poster**

148. Oliveira, A. C., Filipe, H. A., Salvador, A., Sun, R., Voth, G. A., Geraldes, C. F. G. C., Moreno, M. J., Loura, L. M. S., *Modelling Gd-DOTA for molecular dynamics simulations in water and in presence of lipid bilayers*, VIII EJIBCE (Encontro de Jovens Investigadores de Biologia Computacional Estrutural). 20<sup>th</sup> December 2021. Coimbra, Portugal. **Poster**

149. Pimenta, S., Raposo, J., Alves-Guerreiro, J., Flora, S., Caceiro, R., Morais, N., Oliveira, A., Silva, C.G., Silva, S., Valente, C., Andrade, L., Rainho, A., Martins, V., Marques, A., Cruz, J., *Motivos para a Prática de Atividade Física e Atividade Física Atual em pessoas com DPOC* (e-Poster 99), XI Congresso Nacional de Fisioterapeutas, Lisboa, 2021. **Poster**  
URL: <https://youtu.be/hrk2fPc92Oc>

150. Pires, M. N., Marques-Pereira, C., Pereira, N. N., Caniceiro, A. B., Gouveia, R. P., Rosário-Ferreira, N., Moreira, I. S., *SARS-CoV-2 membrane protein: from genomic data to structural new insights*. 8th Meeting of Young Researchers in Structural Computational Biology, Coimbra, 2021. **Poster**.

151. Raposo, J., Pimenta, S., Alves-Guerreiro, J., Flora, S., Caceiro, R., Morais, N., Oliveira, A., Silva, C.G., Ribeiro, J., Silva, F., Januário, F., Carreira, B.P., Rodrigues, F., Marques, A., Cruz, J., *Perfil de atividade física de pessoas com Doença Pulmonar Obstrutiva Crónica (DPOC) em Portugal* (e-Poster 106), XI Congresso Nacional de Fisioterapeutas, Lisboa, 2021. **Poster**  
URL: <https://youtu.be/pww-bFmoMtA>

152. Rodrigues, J. R., Vaz, D. C., Redfield, C., Brito, R. M. M., *It takes two for bridging: MD simulations on IL-4 disulphide mutants*. Symposium Coimbra Chemistry Center Day 2021, Coimbra, Portugal, 2021. **Poster**

153. Rosário-Ferreira, N., Melo, R., Moreira, I. S., Brito, R. M. M., *NS1 dimer behavior through a Molecular Dynamics lens*. Symposium Coimbra Chemistry Center Day 2021, Coimbra, Portugal, 2021. **Poster**

154. Santos, R. M. S., Oliveira, A. C., Filipe, H. A. L., Moreno, M. J., Loura, L. M. S., *Interaction of the antibiotic Rifampicin with lipid membranes: molecular dynamics simulations*, Coimbra Chemistry Centre Day 2021. 15<sup>th</sup> December 2021. Coimbra, Portugal. **Poster**

155. Vieira, A., Dias, D., Miguel, E., Matos, T., Flora, S., Santos, L., Oliveira, A., Marques, A., Silva, C.G., Cruz, J., *Relação entre a Fadiga e a Atividade Física na DPOC (e-Poster 121)*, XI Congresso Nacional de Fisioterapeutas, Lisboa, 2021. **Poster**

URL: <https://youtu.be/8y4qybLpeGk>

## RELATÓRIOS TÉCNICOS

1. Caridade, Pedro J. S. B., Guidelines for a data-driven CRFS management platform, Cities2030 consortium under the supervision of the project's coordinator, 2021.

## ORGANIZAÇÃO DE CONFERÊNCIAS CIENTÍFICAS E SEMINÁRIOS Nacionais e Internacionais

1. Fausto, R., XIV Encontro de Química-Física da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 29-31 March 2021 (Member of the Scientific Committee) – online

2. Fausto, R., European Meeting on Physical Organic Chemistry – Chemistry in a Confined Space, Wroclaw, Poland, 13-17 September 2021 (Member of the Scientific Committee)

3. Fausto, R., 7PyChem – Portuguese Young Chemists Meeting, Bragança, 19-21 May 2021 (Member of the Scientific Committee) – online

4. Fausto, R., Analyticon 2021, Analytical and Bioanalytical Methods Conference, Boston, USA, 18-20 October 2021 (Member of the Organizing Committee)

5. Fausto, R., Nunes, C. M., CQCDay – Dia do Centro de Química de Coimbra, Coimbra, 15 December 2021 (Members of the Organizing Committee).

6. Nogueira, B. A., IX Encontro da Divisão de Ensino e Divulgação da Química – Cascais, 26-27 November 2021 (Member of the Organizing Committee).

7. Justino, L. L. G., VII Encontro Científico do NEQ/AAC, Coimbra, 11-13 November (Member of the Scientific Committee).

8. Eusébio, M. E. S., Membro da Comissão Organizadora do 14<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química-Física da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2021.
9. Carrilho, R. M. B, Pinto, S. M. A., Organização de seminário e demonstração laboratorial para o Centro Escolar Sérgio Mendes de Melo de Areias: *A Química vem à Escola*, 2021
10. Carrilho, R. M. B, Pinto, S. M. A., Organização de seminário e demonstração laboratorial para a Escola Básica e Secundária de Ferreira do Zêzere: *À Descoberta da Química e Química na Escola*, 2021
11. Costa, E., Membro da organização da 4<sup>a</sup> Edição do Curso Pós-Graduado de Atualização de Ciências em Animais de Laboratório Categoria B, Faculdade de Farmácia da Universidade de Lisboa, Lisboa, 2021.
12. Duque-Prata, A., Pinto, T. B., Organização do Digital Colloquium of Chemistry Students in Portugal 2021. 27-29 de Março de 2021, online.
13. Duque-Prata, A., Pereira, D. A., Silva, A. D., Mendes, M. I. P., Lobo, A. C. S., Nogueira, B. A., Organização da 3<sup>o</sup> edição da Escola Molecular – Escola Pré-Universitária de Química, Coimbra, 2021
14. Gomes-da-Silva, L. C., Lima, B., Tão, H., Pereira, M. M., Arnaut, A. G., A low molecular weight carboxamide halogenated bacteriochlorin for the treatment of highly aggressive tumors, Coimbra Chemistry Center Day, 15th December 2021. Oral communication
15. Gierlich, P., Donohoe, C., Behan, K., Gomes-da-Silva, L. C., Kelly, D., Senge, M. O., *Covalently cross-linked tetrafunctionalized m-THPC chitosan hydrogels as delivery platforms*. Final of the 3 minutes thesis competition (3MT), University of Coimbra, 5<sup>th</sup> March 2021.
16. Pereira, M. M., Pinto, S. M. A., Aroso, R. T., Organização de seminário no âmbito das atividades labFCTUC para uma turma do 12<sup>o</sup> ano do Agrupamento de Escolas Dr. Manuel Gomes de Almeida: *Como Vencer os Microorganismos? Contribuições da Educação e Ciência*, Espinho, 2021
17. Pereira, M. M., Pinto, S. M. A., Aroso, R. T., Organização de seminário no âmbito da Escola Molecular: *Combate Aos Microorganismos Multiresistentes: Novos Desafios Da Química*, Coimbra, 2021
18. Pinto, S. M. A., Teixeira, D., Organização de seminário para o 2<sup>o</sup>Jardim Escola João de Deus: *Química na Saúde*, Coimbra, 2021.
19. Rodrigues, S. P. J., Membro da Comissão de organização do 14<sup>o</sup> encontro da divisão de química-física da SPQ. Coimbra, 29-31 de março de 2021.
20. Rodrigues, S. P. J., Membro da Comissão de organização do II Congresso internacional de História da Ciência e Ensino (online, São Paulo, Brasil), 26-29 de outubro de 2021.
21. Rodrigues, S. P. J., Membro da Comissão Científica do II Congresso internacional de História da Ciência e Ensino (online, São Paulo, Brasil), 26-29 de outubro de 2021.

22. Rodrigues, S. P. J., Membro da Comissão de organização do 9º Encontro da Divisão de Ensino e Divulgação da Química da SPQ. Cascais, 26-27 novembro de 2021.
23. Cardoso, A. L., Membro da Comissão Organizadora do Coimbra Chemistry Centre, (CQCday2021), Coimbra, 2021.
24. Fausto, R., Pina, J., Nunes, C. M., Cardoso, A. L., Cova, T. F., Almeida, Z. L., Coimbra Chemistry Centre Day (CQCday), Universidade de Coimbra, Coimbra, 2021.
25. Abreu, P. E., Comissão Organizadora do 14º Encontro Nacional de Química Física da Sociedade Portuguesa de Química, online, 2021.
26. Abreu, P. E., Comissão Organizadora do 3º Simpósio de Química Computacional da Sociedade Portuguesa de Química, online, 2021.
27. Marques, J. M. C., Presidente da Comissão Organizadora do 14º Encontro Nacional de Química Física da Sociedade Portuguesa de Química, online, 2021.
28. Marques, J. M. C., Presidente da Comissão Organizadora do 3º Simpósio de Química Computacional da Sociedade Portuguesa de Química, online, 2021.
29. Valente, A., Membro da Comissão Organizadora do 14º Encontro Nacional de Química-Física, Coimbra (online), 2021.
30. Valente, A., Membro da Comissão Científica do 7th International Iberian Biophysics Congress, Coimbra (online), 2021.
31. Valente, A., Membro da Comissão Científica do 16º Congresso Brasileiro de Polímeros, Ouro Preto, Minas Gerais, Brasil, 2021
32. Estesó, M. A., Organizador de 4th Colloquium on Solution Chemistry, Ávila, Espanha, December 2021.
33. Valente, A., Santos, D., Eusébio, E., Brandão, J., Pina, J., Marques, J., Gomes, J. R., Minas da Piedade, M., Rosado, M., Abreu, P., Nunes, S., Rodrigues, S., Membros da Comissão Organizadora do 14º Encontro Nacional de Química Física/ 3º Simpósio de Química Computacional- 14ENQF Coimbra, Portugal, 2021.
34. Almeida, Z. L., Member of the Organizing and Scientific Committee, Symposium Coimbra Chemistry Centre Day 2021, University of Coimbra, Coimbra, Portugal, 15 december 2021.  
URL: <http://cqc.uc.pt/article/CQCday2021#>
35. Coreta-Gomes, F., membro do Comité Organizador. 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress, 14-16 June 2021, Coimbra, Portugal.  
URL: <https://iibc2020.organideia.pt/>
36. Loura, L., membro do Comité Organizador. 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress, 14-16 June 2021, Coimbra, Portugal.  
URL: <https://iibc2020.organideia.pt/>



37. Moreno, M. J., *Chairperson*, membro dos Comit es Organizador e Cient fico. 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress, 14-16 June 2021, Coimbra, Portugal.  
URL: <https://iibc2020.organideia.pt/>

38. Salvador, A., membro dos Comit es Organizador e Cient fico. 7<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress, 14-16 June 2021, Coimbra, Portugal.  
URL: <https://iibc2020.organideia.pt/>

39. Vaz, D. C., Membro da Comiss o Cient fica. 9<sup>o</sup> Congresso Nacional de Biomec nica, Universidade do Porto, Porto, Portugal, 19-20 fevereiro 2021.  
URL: [cnbio2021.wixsite.com/cnb2021/](http://cnbio2021.wixsite.com/cnb2021/)

## TESES

### Teses de Doutoramento

1. Ana Catarina Lobo "*Immunological Effects of Photodynamic Therapy*", Tese de Doutoramento, University of Coimbra. 2021. FCT Medicinal Chemistry Program  
[Orienta o: Arnaut, L. G.]

2. F bio Manuel Santos Rodrigues, *Development of Catalysts and Sustainable Catalytic Processes for Transformation of Olefins Into High Value Products*, Tese de doutoramento em Qu mica, Universidade de Coimbra, 2021.  
[Orienta o: Pereira, M. M.; Co-orienta o: Pineiro, M.]

3. N dia Maldonado-Carmona, *Formulation of photosensitizers for treatment and/or prevention of bacterial biofilm and planktonic bacteria*, Universidade de Coimbra, Universidade de Limoges, Fran a, Doutoramento Europeu, 2021.  
[Orienta o: Pereira, M. M., Calvete M. J. F.]

4. Nuno Guerreiro Alves, *Novas Espiro- $\beta$ -lactamas com Potente Dupla Atividade Antimicrobiana*, Programa Doutoral MedChemTrain (FCT, PD/BD/135287/2017), Universidade de Coimbra, 2021.  
[Orienta o: Pinho e Melo, T. M. V. D.; Co-orienta o: Sim es, C. J. V.]

5. Daniela Ribeiro Pinheiro, *Synthesis, Photophysical and Electrochemical Studies on Tryptanthrin and Indigo Derivatives. Historic Molecules with Modern Applications*, Universidade de Coimbra, 2021  
[Orienta o: Seixas de Melo, J. S., Pineiro, M.]

6. El Mehdi Iourouine, *Evaluation of therapeutic interest of bee venom, as natural bioactive ingredient, in cancer*, Sidi Mohamed Ben Abdellah University Fez, Morocco, 2021.  
[Orienta o Nacional: Professora Doutora Maria da Gra a Campos  
Orienta o Internacional: Professor Doutor Mustapha Harandou, Faculty of Medicine and Pharmacy, Sidi Mohamed Ben Abdellah University Fez, Morocco  
International Joint Supervision entre a Faculty of Medicine and Pharmacy, Sidi Mohamed Ben Abdellah University Fez, Morocco, e a Faculty of Pharmacy of the University of Coimbra, Portugal]

## Teses de Mestrado

1. Vera Alexandra Afonso Gamboa, *Estudo Espectroscópico e Estrutural de Moléculas Fragrantes: Vanilina e Guaiacol*, Mestrado em Química (Controlo da Qualidade e Ambiente), Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Fausto, R.; Lopes, S.]

2. Inês Caria Santos, *Investigação de formas sólidas multicomponente do antibacteriano norfloxacina*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2021.

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

3. Ana Margarida Almeida Marques, *Investigação de cocrystal farmacêuticos e estudos de compatibilidade cocrystal-excipient. Dois casos de estudo: diflunisal-isoniazida e lamotrigina-etossuximida*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2021.

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

4. Francesca Mecagni, *Design and development of new solid forms of nabumetone aimed at enhancing its solubility*, Mestrado Integrado em Química e Tecnologia Farmacêutica, Departamento de Ciências da Vida, Universidade de Modena, Itália, 2021.

[Orientação: Castro, R. A. E.]

5. Ana Carolina Marques de Jesus, *Comparação de resultados entre testes presuntivos/indicadores de sangue, em contexto forense*, Mestrado em Química Forense, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Antunes, B. P. M., Eusébio, M. E. S.]

6. Ana Carolina Silva Fernandes, *Fatores condicionantes na análise de etanol, metanol, 2-propanol e acetona em amostras sanguíneas*, Mestrado em Química Forense, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Monteiro, C., Eusébio, M. E. S.]

7. Ana Catarina Gonçalves Amado, *Utilização de biossensores na deteção precoce da doença de alzheimer*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Castro, R. A. E.]

8. Catarina Isabel Costa Cordeiro, *Cocrystal iónicos: estratégia de desenvolvimento para ativos farmacêuticos sólidos*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra (2021).

[Orientação: Castro, R. A. E.]

9. Francisca de Sousa Alves Janeiro, *Gota tofácea crónica e seu tratamento*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Canotilho, J.]

10. Ricardo António Rodrigues Manso, *Abordagem convencional e dispositivos médicos usados no tratamento da acne vulgar*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Canotilho, J.]

11. Ana Isabel Alves Martins, *linfoma canino – sinais e tratamento*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2021  
[Orientação: Canotilho, J.]
12. Tiago Pinto, *Materiais ultrafinos para produção de ultrassons induzida por laser: Filmes de dióxido de titânio com corante adsorvido*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2021.  
[Orientação: Carlos Serpa; Co-Orientação: Sara Pinto]
13. Daniela Amado Santos, *Estudo da variação conformacional do peptídeo chignolin induzida por salto de pH*, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2021.  
[Orientação: Carlos Serpa]
14. Pedro Afonso Gonçalves Pedrosa Pinto, *Eletroacupuntura: Qual o seu papel?*, Mestrado Integrado em Medicina, Universidade de Coimbra, 2021.  
[Co-Orientação: Costa, E.]
15. Zoé Ladieu Arcas Arnaut Moreira, *Development of cationic photosensitizers for photoinactivation of microorganisms*, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2021  
[Orientação: Pereira, M. M., Pinto, S. M. A.]
16. Ana Rita Rôlo, *Synthesis and Characterisation of a Biocompatible Redox Porphyrin for Application in MRI*, Mestrado em Bioquímica, Universidade de Coimbra, 2021.  
[Orientação: Marques M. P., Pinto, S. M. A., Geraldês, C. F. G. C.]
17. Alexandre Pires Felgueiras, *Catalisadores para desenvolvimento de processos sequenciais sustentáveis*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2021.  
[Orientação: Pereira, M. M., Carrilho, R. M. B.]
18. Joana Sofia da Silva Duarte, *Caracterização de Fotossensibilizadores para Terapia Fotodinâmica*, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2021  
[Orientação: Luis G. Arnaut]
19. Bruna Diana Paiva Costa, *Corróis e Hidrazonas: Dois Aliados na Luta contra o Cancro do Pulmão*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2021.  
[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D.; Coorientação: Lopes, S. M. M.]
20. Cristina Marisa Pinho Gadelho, *Síntese de Ligandos Quirais de Base Tiazolidina para Catálise Assimétrica*, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2021.  
[Orientação: Murinho, D.; Coorientação: Serra, E.]
21. Melissa Viveiros Moniz, *Desenvolvimento de Marcadores de Combustíveis com Base no Furfural*, Mestrado em Química Forense, Universidade de Coimbra, 2021.  
[Orientação: Serra, E.]
22. Diana Isabel Coimbra da Silva, *Vigilância de Suplementos Alimentares Desportivos por GC-MS*, Departamento de Química, Mestrado em Química Forense, Universidade de Coimbra, 2021.  
[Orientação: Serra, E.]

23. José Miguel Coelho de Sousa, *Derivados de tetrafenilporfirinas e de tioindigo para células fotosolares sensibilizadas por corante*, Mestrado em Química, ramo de Química Avançada e Industrial, Universidade de Coimbra, 2021

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

24. Paulo Dinis Costa Matos, *Recuperação de metais através da adsorção com aerogéis de sílica*, Mestrado Integrado em Engenharia Química, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Durães, L., Valente, A. J. M.]

25. Filipa Amaro Santos, *Síntese de estruturas covalentes orgânicas para a adsorção de metais pesados em meio aquoso*, Mestrado em Química Avançada e Industrial, Universidade de Coimbra, 2021.

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

26. Pedro Ribeiro Lourenço de Matos Neves, *Desenvolvimento e validação de métodos analíticos para a determinação de microcistinas e herbicidas em matrizes aquosas*, CESAB - Centro de Serviços do Ambiente (Mealhada)., Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Pereira, J. C.]

27. Daniel José Ferreira Santos, *Controlo da qualidade ao nível de uma indústria farmacêutica*, FARMALABOR (Grupo Medinfa, Condeixa), Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Pereira, J. C.]

28. Soraia Saldanha Pedro, *Síntese de Novos Bodipy's para Terapia Fotodinâmica*, Mestrado em Engenharia Biomédica, Departamento de Química da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra em colaboração com o IBILI, da Faculdade de Medicina, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Sobral, A.]

29. Margarida Gonçalves Santos, *Biomaterials for PET Diagnosis*, Mestrado em Engenharia Biomédica, Departamento de Química da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra em colaboração com o IBILI, da Faculdade de Medicina, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Sobral, A.]

30. Soraia Assis, *Characterizing the Emerging Psychoactive Drugs by Mining Data from Chemical Databases and Molecular Simulations*, Mestrado em Química Forense, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Nunes, S. C. C., Cova, T. F.]

31. Cláudia Filipa Soares Ferreira, *Mycotoxins: identification and characterization using machine learning as a playground*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Cova, T. F., Pais, A.]

32. Ariana Amorim Sena, *Development and optimization of methodologies to assess buccal permeation*, Mestrado em Biotecnologia Farmacêutica, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Vitorino, C.]

33. Andreia Daniela Matos Aleixo, *Nanobolhas: princípios, aplicações Farmacêuticas e perspetivas futuras*, Mestrado em Ciências Farmaceuticas, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Vitorino, C.]

34. João Pedro Pinto Oliveira Batista, *Continuous manufacturing: Hype or Reality?*, Mestrado em Ciências Farmaceuticas, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Vitorino, C.]

35. Luís Miguel Amado de Andrade, *Nanocelulose: avanços e perspetivas futuras em tecnologia farmacêutica*, Mestrado em Ciências Farmaceuticas, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Vitorino, C.]

36. Laura Domingues Carreira, *Potencial terapêutico da Cannabis sativa no tratamento de Perturbações do Espectro do Autismo*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas da Faculdade de Farmácia da Universidade de Coimbra, 2021

[Orientação: Campos, M. G.]

37. Bruno Jorge Teixeira da Silva, *Canabinóides no Tratamento da Dor crónica associada à Fibromialgia*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas da Faculdade de Farmácia da Universidade de Coimbra, 2021

[Orientação: Campos, M. G.]

38. Adriana dos Santos Nunes, *Spirulina (Arthrospira): Reabilitação Nutricional em Casos de Subnutrição Infantil*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas da Faculdade de Farmácia da Universidade de Coimbra, 2021

[Orientação: Campos, M. G.]

39. Ana Rita Rolo Ferreira, *Synthesis and Characterization of a Biocompatible Fluorinated Mn(III)-Porphyrin as a Redox Responsive <sup>19</sup>F-NMR/T1 Bimodal MRI Contrast Agent*, Mestrado em Bioquímica, Universidade de Coimbra, 2021

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

40. Guilherme de Matos Simões, *Estudo Computacional Da Interação Da Rodamina B Com Sistemas Modelo De Membranas Biológicas*. Mestrado em Bioquímica, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Loura, L. M. S.]

41. Inês João Veríssimo Cabete, *Characterization of the effect of an anti-inflammatory drug in a glioblastoma rat model using MRI approaches*, Mestrado em Biologia Celular e Molecular, Universidade de Coimbra, 2021 (co-supervision with Pilar Lopez Larrubia, Instituto de Investigaciones Biomédicas "Alberto Sols", CSIC/Universidad Autónoma de Madrid, Madrid, Spain

[Orientação: Castro, M. M. C. A.]

42. Joana Rita Mendes Brás, *Síntese e caracterização de derivados de DOTA com maior permeabilidade através de biomembranas, para utilização em MRI*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Moreno, M. J.; Co-orientação: Pineiro, M]

43. Rui Miguel Simões Santos, *Interação do Antibiótico Rifampicina com Membranas Lipídicas - Caracterização Experimental e Simulações de Dinâmica Molecular*. Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2021.

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

### **Outras Teses (Estágio de Licenciatura)**

1. Sofia Silva Sousa Braz, *Síntese, Estrutura e Propriedades Espectroscópicas e Fotofísicas de Complexos de Ga(III) e Sulfonato de Alizarina*, Licenciatura em Química, 2021.

[Orientação: Fausto, R.; Justino, L. L. G.]

2. Maria Beatriz Ana Carvalho, *Estudo Computacional e Espectroscópico de três Compostos da Família do ROY (5-Metil-2-[(2-nitrofenil)amino]-3-tiofenocarbonitrilo)*, Licenciatura em Química, 2021.

[Orientação: Fausto, R.; Nogueira, B. A.]

3. Pedro Miguel Gonçalves Sousa, *New solid forms of pitavastatine calcium*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2021.

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

4. Inês Carolina Ribeiro Pardal, *Diagrama de Fases Sólido-Líquido de misturas binárias de enantiómeros:(R)-2'(((1S,2R,5S)-2-Isopropil-5-metilciclohexil)oxi)-[1,1'-binaftaleno]-2-ol e (S)-2'(((1R,2S,5R)-2-Isopropil-5-metilciclohexil)oxi)-[1,1'-binaftaleno]-2-ol*, Licenciatura em Química, 2021.

[Orientação: Maria, T. M. R.]

5. Cláudia Cardoso, *Permeações cutâneas de formulações contendo peptídeos*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2021.

[orientação: Carlos Serpa; co-orientação: R. Cardoso]

6. Maria Antónia Carvalho, *Avaliação da calreticulina como marcador de morte celular imunogénica em terapia fotodinâmica*, Licenciatura em Química Medicinal, 2021.

[Orientação: Lígia C. Gomes da Silva]

7. Evheni Seletchi, *Evaluation of Drug resistance to Photodynamic Therapy*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2021

[Orientação: Arnaut, L. G.]

8. Joana Inês Costa Santos, *Agentes de contraste para imagiologia fotoacústica*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2021

[Orientação: Arnaut, L. G.]

9. Soraia Filipa Rodrigo Ferreira, *Libertação controlada de fármacos*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2021

[Orientação: Arnaut, L. G.]

10. André João da Silva Falcão, *Estudos de novas formulações para fotossensibilizadores lipofílicos e sua estabilidade*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2021  
[Orientação: Arnaut, L. G.]
11. Yaroslav Hrihoriev, *Síntese de metaloftalocianinas para potencial aplicação em tomografia fotoacústica*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2021  
[Orientação: Calvete M. J. F.]
12. Carolina Neto, *Síntese de um catalisador heterogéneo baseado em porfirina para degradação de antibióticos*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2021  
[Orientação: Pereira, M. M., Calvete M. J. F.]
13. Josélia Sousa, *Síntese de ftalocianinas hidrofílicas*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2021  
[Orientação: Pereira, M. M., Calvete M. J. F.]
14. Inês Cruz, *Processos Catalíticos para Transformação de CO<sub>2</sub> em Produtos de Valor Acrescentado*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2021  
[Orientação: Pereira, M. M., Carrilho, R. M. B.]
15. Carolina Domingos, *Síntese de fotossensibilizadores para inativação fotodinâmica de microorganismos*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2021  
[Orientação: Pereira, M. M.]
16. Maria Pereira Honório, *A química analítica e as ferramentas de qualidade desde a sua origem à atualidade*, Licenciatura em Química, 2021.  
[Orientação: Rodrigues, S. P. J.]
17. João Victor Rocha Gonçalves, *Estudo da Cicloadição 1,3-Dipolar para a Síntese de Esproisoxazolino- $\beta$ -penicilanatos Quirais: Abordagem Convencional e em Fluxo Contínuo*, Licenciatura em Química, 2021.  
[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D.; Tutor: Alves, A.]
18. Sofia Félix Duarte, *Novos BODIPYs como Agentes de Imagem de Fluorescência*, Licenciatura em Química Medicinal, 2021.  
[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D.; Coorientação: Susana Lopes, S. M. M.]
19. Guilherme Duarte Serrão, *Catálise Enantiosseletiva com Tiazolidinas*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2021.  
[Orientação: Serra, E.]
20. João Pedro Herbert Serôdio, *Síntese de Ligandos Quirais de Base Ácido Canfórico para Reações de Hidrossilação Assimétrica de Cetonas*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2021.  
[Orientação: Murtinho, D.]
21. Bárbara Ramalho, *Síntese de Novos 1,2,3-Triazóis-Azirinas como Potenciais Reativadores da p53 Mutante*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2021.  
[Orientação: Lopes, S. M. M.]

22. Mariana Marques Costa, *Síntese Sustentável de Ligandos tris-Pirazole, Complexos C-Escorpionatos de Cobre e a sua Aplicação como Catalisadores*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Pineiro, M.]

23. Arianna C. Marante, *Síntese e Avaliação in Silico de Druglikeness da Triptantrina e seus Derivados*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Pineiro, M.]

24. Juliana Melo Castanheira, *Métricas em Química Verde*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Pineiro, M.]

25. Ana Margarida R. Mateus, *Development of Tryptanthrin-loaded Halloysite Clay Nanotubes Formulation for Skin Delivery*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Pineiro, M.; Co-orientação: Santos, A. C. P.]

26. Petra Albuquerque, *Estudo da Reologia e influência da temperatura em sistemas de Carbopol 940*, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Antunes, F. E.]

27. Ana Carolina Frade Melo, *Selective detection of Krebs cycle species by aminoacid-coumarin derivatives*, Licenciatura em Química Medicinal, 2021.

[Orientação: Delgado-Pinar, E.; Canelas pais, A.]

28. Andreia Filipa Da Costa Tuna, *Fighting Oxidative stress with hydroxycoumarins*, Licenciatura em Química Medicinal, 2021.

[Orientação: Delgado-Pinar, E.; Sérgio Seixas de Melo, J.]

29. Paulo David Nunes Barradas, *photocorms: moléculas libertadoras de CO por irradiação: Estudos fotofísicos, fotoquímicos e computacionais*, Licenciatura em Química, 2021.

[Orientação: Seixas de Melo]

30. Adelino Pereira, *Pseudoplasticidade na farmacologia: potencial da goma xantana em hidrogéis para enchimento ósseo*, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Antunes, F. E.]

31. Inês Alexandre Azul, *Reflexões sobre a norma ISO 6878, Water quality - Determination of phosphorus – Ammonium molybdate spectrometric method*, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Pereira, J. C.]

32. Cristiana Rodrigues Martins, *Diagnóstico e Otimização de Condições Analíticas: determinação de cálcio em produtos derivados do leite*, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Pereira, J. C.]

33. Nicole Ferreira Vidinha, *Diagnóstico e Otimização de Condições Analíticas: determinação de TOC em águas de consumo*, Universidade de Coimbra, 2021.

[Orientação: Pereira, J. C.]



34. Catarina Vieira Gonçalves, *Diagnóstico e Otimização de Condições Analíticas: Determinação de Potássio por Espectrofotometria de Absorção Atômica*, Universidade de Coimbra, 2021.  
[Orientação: Pereira, J. C.]
35. Tiago L. Silva, *Análise multivariada no diagnóstico de doenças inflamatórias do trato urinário*, Universidade de Coimbra, 2021.  
[Orientação: Pereira, J. C.]
36. Diana Pinheiro Correia, *Como se ligam fragmentos moleculares de potenciais medicamentos a proteínas-alvo?*, Licenciatura em Química Medicinal, 2021.  
[Orientação: Marques, J. M. C.]
37. Ana Luísa Casanova, *Nanoestruturas de ADN como transportadores de fármacos antimicrobianos: Um estudo de Dinâmica Molecular*, Licenciatura em Química Medicinal, 2021.  
[Orientação: Nunes, S. C. C.; Cova, T. F.]
38. Joana Raquel dos Santos Simões, *Poluentes emergentes e semelhança estrutural: um estudo computacional*, Licenciatura em Química, 2021.  
[Orientação: Cova, T. F.; Pais, A. C.]
39. Mariana S. Melo, *Otimização de processos para a caracterização de nanopartículas lipídicas sólidas para a administração de fármacos*, Licenciatura em Química Medicinal, 2021.  
[Orientação: Cova, T. F.; Pais, A. C.; Vitorino, C.]
40. Cindy Lourenço, *Filmes de misturas poliméricas de PVA/quitosano e PVA/ADN para encapsulação de paracetamol: Síntese e caracterização*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2021  
[Orientação: Valente, A.; Pais, A. C.; Vitorino, C.]
41. Bruna Eliana Lima Nazaré Duarte, *Interação dos Ácidos Biliares com a Quitosana*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2021.  
[Orientação: Coreta-Gomes, F.; Co-Orientação: Moreno, M. J.]
42. Dafne S. Oliveira, *Mecanismos de agregação e co-agregação do peptídeo de Alzheimer e Transtirretina*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2021.  
[Orientação: Brito, R. M. M.]
43. Elisa Irene Branquinho Foulquié, *Estudos relaxométricos da eficiência de um agente de contraste para MRI e da sua ligação à albumina*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2021.  
[Orientação: Castro, M. M. C. A.]
44. Elsa Margarida Fonseca Cardoso Loureiro, *Preparação de vesículas lipídicas com proteína encapsulada - Comparação de diferentes metodologias*, Licenciatura em Bioquímica, Universidade de Coimbra, 2021. [Orientação: Moreno, M. J.]
45. João André Bastos Cordeiro de Jesus, *Preparação de géis de albumina sérica para estudos de ligação de pequenas moléculas*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2021. [Orientação: Moreno, M. J.]

## PROTÓTIPOS LABORATORIAIS

### SOFTWARE

1. Caridade, Pedro J. S. B., *Air pollution quantification based on satellite imagery netcdf format (big data approaches)* (2020–, GNU2 license.  
<https://github.com/pcaridade/cams>)
2. Caridade, Pedro J. S. B., *Ψbuntu: Quantum Chemistry Tailored Live Linux OS for Computational Chemistry Classes based on Ubuntu MATE 20.04 LTS* (2020–, GNU2 license.  
<https://github.com/pcaridade/psibuntu>).
3. Martínez-Núñez, E., Rodríguez-Fernández, R., Vázquez-Rodríguez, S. A., Marques, J. M. C., Pereira, F. B., *GAFit: A general-purpose, user-friendly program for fitting potential energy surfaces*, 2011. Número de registo: 03/2021/425 (Registro Territorial da la Propriedade Intelectual, Xunta da Galicia, Espanha).  
Titulares cessionários: Universidade de Santiago de Compostela, Universidade de Coimbra.

### PATENTES

1. *Device for efficient delivery of compounds to or through the skin or biological barriers using light absorbing films.*  
Inventores: G. F. F. Sá, C. Serpa Soares, L. G. Arnaut Moreira, Universidade de Coimbra.  
Patente nº BR 11 2013 025357-6. Data de concessão no Brasil: 04/05/2021.
2. *Low molecular weight derivatives of carboxamide halogenated porphyrins, namely chlorins and bacteriochlorins, and their applications in photodynamic therapy.*  
Inventores: G. P. N. Costa, N. P. F. Gonçalves, C. J. P. Monteiro, A. C. R. Abreu, H. T. Soares, L. B. Rocha, F. A. Schaberle, M. M. Pereira, L. G. Arnaut Moreira. Luzitin SA e Universidade de Coimbra.  
Patente nº CN107624114. Data de concessão na China: 23/03/2021.
3. *(3S) - AND(3R)-6,7-BIS(HYDROXYMETHYL)-1H,3H-PYRROLO[1,2-C]THIAZOLES AS P53 ACTIVATORS.*  
Inventores: L. H. A. Saraiva, J. O. G. Soares, T. M. V. D. Pinho e Melo, M. I. L. Soares, H. I. N. R. Rocha. Requerentes: Universidade do Porto, Universidade de Coimbra.  
Patente nº 20210315866 [EP2019730929 (A1), US20210315866 (A1)]. Data de concessão: 14/10/2021.
4. *Bis-furan derivatives as transthyretin (TTR) stabilizers and amyloid inhibitors for the treatment of familial amyloid polyneuropathy (FAP).*  
Inventores: C. J. V. Simões, Z. C. L. Almeida, T. M. V. D. Pinho e Melo, R. M. P. M. F. Brito, D. C. S. Costa, A. L. C. Lopes. Requerente: BSIM Therapeutics, S. A. Coimbra (PT)  
Patente nº 3307723 T3. Data de concessão na Dinamarca: 11/01/2021

5. *Complexos poliméricos de lantanídeos luminescentes e matrizes de fibras celulósicas funcionalizadas para detecção de contrafação.*

Inventores: A. J. M. Valente, A. A. C. C. Pais, D. M. B. Murtinho, A. F. Y. Matsushita, M. P. R. T. Faro.  
Pedido de Patente 20201000011960 (2020/03/05-09:12:07), PCT/IB2021/051710 (submission number 051710, 02.March.2021)

6. *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.  
Pedido Patente 20211000004842 (2021/02/08-11:51:32), nº 117053.

7. *Copolímero cromogénico, seu método de obtenção, produtos que o incorporam e método de detecção de contrafação e autenticação de produtos.*

Inventores: S. V. Calzada, M. G. Guembe, J. C. G. Moreno, J. M. G. Pérez, R. J. A. Garcia, A. J. M. Valente, A. P. M. Sousa.  
Pedido Patente 20211000037439 (2021/09/30-14:39:44); PCT/IB2021/062484 (submission number 062484, 30 December.2021)

8. *Water-soluble tryptanthrin derivatives for redox flow batteries.*

Inventores: M. Piñeiro Gomez, D. R. Pinheiro, J. S. Seixas de Melo. Universidade de Coimbra.  
Pedido de patente internacional em 09/09/2021 (nº PCT/IB2021/058195).

9. *Bis-furan derivatives as transthyretin (TTR) stabilizers and amyloid inhibitors for the treatment of familial amyloid polyneuropathy (FAP);* European Patent EP3307723; United States Patent 10,377,729.

Inventors: Vieira Simões, Carlos José; Lourenço de Almeida, Zaida Catarina; Vasconcelos Dias de Pinho e Melo, Teresa Margarida; Pontes Meireles Ferreira de Brito, Rui Manuel; Silva Costa, Dora Cristina; Cabral Cardoso Lopes, Ana Lúcia.

Applicant: BSIM THERAPEUTICS, S.A. - Granting date USA: August 13, 2019 - Granting date Europa: 11/11/2020 - Published Denmark: 02-2021 - Published Netherlands: 22/01/2021 - Published Sweden: 16/02/2021

10. *2-thioxothiazolidin-4-one derivatives active as transthyretin ligands and uses thereof.*

Inventors: Pontes Meireles Ferreira de Brito, Rui Manuel; Vieira Simoes, Carlos Jose; Vasconcelos Dias de Pinho e Melo, Teresa Margarida; Victor, Bruno Lourenco da Silva; Lourenco de Almeida, Zaida Catarina; Lopes, Ana Lucia Cabral Cardoso; Nascimento, Bruno Filipe Oliveira.

Applicant: BSIM THERAPEUTICS, S.A.

United States Patent 11,117,877. Granting date USA: September 14

**ARTIGOS PUBLICADOS EM ATAS DE CONGRESSOS INTERNACIONAIS  
COM REVISÃO POR PARES**

1. Rodrigues, S. P. J., Garcia, T. M. O., Pérez-Parallé, M. L., Non-formal Education Outside Buildings: The Case of Shore Chemistry. In Proceedings of the 11th International Conference the Future of Education, Firenze: Filodiritto, 2021, pp. 318-321.

ISBN: 979-12-80225-23-8

DOI: 10.26352/F701\_2384-9509

2. Rodrigues, S. P. J., Chemistry and Society: Peer-Review as Teaching and Evaluation Devices within a Multitude of Subjects. in Proceedings of the New Perspectives in Science Education 10th Edition, Firenze: Filodiritto, 2021, pp. 300-3004.

ISBN: 979-12-80225-14-6

DOI: 10.26352/F318\_2384-9509

**ARTIGOS PUBLICADOS EM ATAS DE CONGRESSOS NACIONAIS  
COM REVISÃO POR PARES**

1. Rodrigues, S. P. J., *Todos ficarão nus! Uma história dos plásticos nas roupas interiores.* in Evolução da Química: Impactos na Sociedade. 1º Encontro Nacional de História da Química. Aveiro: UA, 2021, pp. 137-140.

ISBN: 978-972-789-705-6

2. Oliveira, F., Rodrigues, S. P. J., *A História Química de uma Vela de Michael Faraday dez anos depois.* In Evolução da Química: Impactos na Sociedade. 1º Encontro Nacional de História da Química. Aveiro: UA, 2021, pp. 141-143.

ISBN: 978-972-789-705-6

3. Garcia, T., Pérez-Parallé, M. L., Rodrigues, S. P. J., *História dos programas escolares europeus e da ligação destes à água e ao mar.* In Evolução da Química: Impactos na Sociedade. 1º Encontro Nacional de História da Química. Aveiro: UA, 2021, pp. 149-152.

ISBN: 978-972-789-705-6

4. Caridade, P. J. S. B., Rodrigues, S. P. J., *Uma História da Química Computacional.* In Evolução da Química: Impactos na Sociedade. 1º Encontro Nacional de História da Química. Aveiro: UA, 2021, pp. 189-193.

ISBN: 978-972-789-705-6

5. Peres, M., Rodrigues, S. P. J., *Visconde de S. Romão e Visconde de Vila Maior: contributos para a química e a sociedade.* In Evolução da Química: Impactos na Sociedade. 1º Encontro Nacional de História da Química. Aveiro: UA, 2021, pp. 194-198.

6. Gaudêncio, J., Rodrigues, S. P. J., Martins, D., Silveira Foggiatto, R. M. C., *Saber Indígena Kaingang: Historiografia, Etnociência e Educação Científica.* In Evolução da Química: Impactos na Sociedade. 1º Encontro Nacional de História da Química. Aveiro: UA, 2021, pp. 199-204.

7. Vilarim, P. R., Martins, D., Oliveira, J. E., Rodrigues, S. P. J., *O Etnoconhecimento dos Terenas: da Prática Cultural à Educação Científica*. In *Evolução da Química: Impactos na Sociedade*. 1º Encontro Nacional de História da Química. Aveiro: UA, 2021, pp. 205-208.

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

1. Santos, P. P., Vaz, P. G., Gaudêncio, A. S. F., Morgado, M., Pereira, N. A. M., Pineiro, M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Cardoso, J., *Compressive single pixel phosphorescence lifetime and intensity simultaneous imaging: a pilot study using oxygen sensitive biomarkers*, *Proc. SPIE 11775, Integrated Optics: Design, Devices, Systems and Applications VI*, 1177511, 2021.

DOI: 10.1117/12.2588266