

INDICADORES DE DESEMPENHO CIENTÍFICO CQC – 2019

LIVROS E CAPÍTULOS DE LIVROS

1. Cruz, S. M. A., Marques, P. A. A. P., Valente, A. J. M, *Supramolecular Graphene-Based Systems for Drug Delivery*, in *Handbook of Graphene*, Ozkan C. Ed. Scrivener Publishing LLC, New York, Chapter 15, pp 443-479, 2019.

DOI: 10.1002/9781119468455.ch67

2. Santos, C. I. A. V, Shevtsova V., Ribeiro A. C. F., *Diffusion and thermodiffusion in hydrocarbon mixtures*, in *Innovations in Physical Chemistry, Chemical Science and Engineering Technology - Perspectives on Interdisciplinary Research*, Eds. Apple Academic Press Inc., in press, 2019.

Hard ISBN: 9781771887052. E-Book ISBN: 9781351048323

3. Ramos, M. L., Justino, L. L. G., Cruz, P. F., Burrows, H. D., *Peroxo complexes of some transition metal ions with d^0 electronic configurations - Structural and reactivity considerations*, in *Innovations in Physical Chemistry, Engineering Technology and Industrial Chemistry with Applications*, Eds. Haghi R. K., F. Torrens, Apple Academic Press, Toronto, New Jersey, Chapter 11, pp 209-234, 2019.

ISBN: 9781771886376.

4. Ribeiro, A. C. F., *Transport coefficients in multicomponent systems. Mutual Diffusion, Self-diffusion and Tracer Diffusion*). *Composite Materials Engineering Modeling and Technology*. Eds. Vakhruhev, A. V., Hagui, A. K., Apple Academic Press, Inc./CRC, in press, 2019.

ISBN:9781771887960

5. Verissimo, L. M. P., Ribeiro, A. C. F., Rodrigues, D. F. S. L., Cabral, A. M. T. D. P. V., Estes, M. A., *Influence of Fructose in the Diffusion of Sodium Borate in Aqueous Solutions at 298.15 K*, in *Research Methods and Applications in Chemical and Biological Engineering. Part I: Analytical and Experimental Methods*, Pourhashemi, Eds., A., Deka, S.Ch., Haghi, A. K Apple Academic Press, Oakville, Canada, Chapter 7, pp 83-94, 2019.

ISBN: 978-0-42942-413-7

6. Jorge, A., Pais, A., Vitorino, C., *Targeted siRNA delivery using lipid nanoparticles*, in *Kewal K. Jain (Ed), Drug Delivery System: Methods and Protocols, Third Edition*, Springer, Nova Iorque, Estados Unidos da América, Chapter 14, pp. 259-284, 2019.

ISBN 978-1-4939-9797-8

7. Mendes, M., Barone, A., Sousa, J., Pais, A., Vitorino, C., *Gold nanorods as theranostic nanoparticles for cancer therapy*, em *Dr. Mahendra Rai, Dr. Alka Yadav (eds), Nanobiotechnology in Cancer*, Springer Verlag, Alemanha, Chapter 16, pp.363-404, 2019.

ISBN 978-3-030-29767-1

8. Vieira, E., Campos, M., Lucas, F., *The case of mururé (Brosimum acutifolium Huber) in the treatment of syphilis in colonial Amazonia: Historical data and their contribution to present medicine*, In *ETHNOBOTANY: Local Knowledge and Traditions*. Ed. Martinez, J., Muñoz-Acevedo, A. and Mahendra, R., Taylor & Francis Group, India, Chapter 1. pp 1-18 2019.

ISBN: 978-1-138-38898-7

9. Crans, D.C., Barkley, N.E., Montezinho, L., Castro, M. M. C. A., *Vanadium Compounds as Enzyme Inhibitors with a Focus on Anticancer Effects*, em *Metal-based Anticancer Agents, Metallobiology Series No. 14*, Casini, A., Vessières A., Meier-Menches S. M., Eds., The Royal Society of Chemistry, London, Chap 7, pp. 169-195, 2019

DOI: 10.1039/9781788016452-00169

ISBN: 978-1-78801-406-9

10. Loura, L. M. S., Prieto, M., Fernandes, F., *Förster Resonance Energy Transfer as a Tool for Quantification of Protein-Lipid Selectivity*, em *Lipid-Protein Interactions - Methods and Protocols*, 2nd Edition, Kleinschmidt, J. H., Ed., Humana, New York, Chap 16, pp. 369-382, 2019

DOI: 10.1007/978-1-4939-9512-7_16

ISBN: 978-1-49399-511-0

11. Loura, L. M. S., Prieto, M., *Fluorescence and FRET in Membranes*, em *Encyclopedia of Biophysics*, Roberts, G., Watts, A., European Biophysical Societies Association, Eds., Springer, Berlin, Heidelberg, 2019

DOI: 10.1007/978-3-642-35943-9_559-1

ISBN: 978-3-642-35943-9

12. Koleżyński, A., Dorosz, D., Ryzkowski, J., Fausto, R., Eds., *J. Mol. Struct. (Special Issue: ICMS2017 - From Molecules to Functional Materials: A collection of contributions presented at the XIVth International Conference on Molecular Spectroscopy)*, Elsevier Science, Amsterdam (Holland), 2019.

URL: <https://www.sciencedirect.com/journal/journal-of-molecular-structure/special-issue/10LB51331MM>

13. Fausto, R., Nikitin, T., Brás, E. M., *Light Induced Reactions in Cryogenic Matrices. Highlights 2017-2018*. In "Specialistic Reports in Photochemistry", (Albini, A.; Fasani, E. and Protti, S., Eds.), Royal Society of Chemistry. Vol. 47 (2019), Chapter 1, pp. 22-67.

ISBN (Print): 978-1-78801-554-7

eISBN (pdf): 978-1-78801-652-0

14. Ildiz, G. O., Schmitt, M., Fausto, R., Eds., *J. Mol. Struct. (Special Issue: Molecular Spectroscopy and Molecular Structure – A Collection of Contributions Presented at the 34th European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS 2018))*, Elsevier Science, Amsterdam (Holland), 2019.

URL: <https://www.sciencedirect.com/journal/journal-of-molecular-structure/special-issue/10K38VRWPKC>

15. Reva, I., Nunes, C. M., Lopes de Jesus, A. J., *Molecules (Special Issue: Photochemical Reactions at Low Temperature)*, MDPI Publishers, Basel (Switzerland), 2019.

URL: https://www.mdpi.com/journal/molecules/special_issues/Photochemical_Reactions_Low_Temperature

16. Pereira, M. M., Carrilho, R. M. B., Calvete, M. J. F., *Tervalent Phosphorus Acid Derivatives*, in *Organophosphorus Chemistry* Volume 48, Allen, D. W., Loakes, D., Tebby, J. C. Eds., Specialist Periodical Reports Series, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, pp 64-102, 2019. DOI: 10.1039/9781788016988

ISBN: 978-1-78801-499-1

17. Vinagreiro, C. S., Aroso, R. T., Dias, L. D., Pereira, M. M., Paixão, F., *Resistência a antibióticos: também um problema de educação?*, in *A escola de aprender - Contributos para a sua construção*, Paixão, F., Jorge, F. R., Silveira, P. Eds., Castelo Branco (Portugal), Vol. 1, pp. 200-212, 2019.

ISBN: 978-989-8196-93-4

18. Rodrigues, S. P. J., *What can Chemists and the Public Learn from Biographies of Chemists?* In *Perspectives on Chemical Biography in the 21st Century*, Malaquias, I, Morris. P. Eds., Chap 6, pp. 64-74, 2019.

ISBN: 978-1-5275-2275-6

19. Rodrigues, S. P. J., *Moléculas psicotrópicas e Literatura: Uma Visão Química* in *História Interdisciplinar da Loucura, Psiquiatria e Saúde Mental IX*, Pereira, M. L., Pita, J. R., Eds., pp. 73-93, 2019.

ISBN: 978-989-54124-9-5

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

1. Pina, J., de Castro, C. S., Delgado-Pinar, E., Seixas de Melo, J. S., *Characterization of 4-methylesculetin and of its mono- and di-methoxylated derivatives in water and organic solvents in its Ground, Singlet and Triplet Excited State*, *J. Mol. Liq.*, 278, pp 616–626, 2019.
DOI: 10.1016/j.molliq.2019.01.083
2. Delgado-Pinar, E., Valente, A. J. M., Seixas de Melo, J. S., *A comprehensive photophysical and NMR investigation on the interaction of a 4-methylumbelliferone derivative and cucurbit[7]uril*. *J. Mol. Liquids*, 277, pp 1026–1034, 2019.
DOI: 10.1016/j.molliq.2018.12.137
3. Seixas de Melo, J. S., *Comment on “An ‘imperial radiation’: Experimental and theoretical investigations of the photo-induced luminescence properties of 6,6′-dibromoindigo (Tyrian purple)”*, *Dyes and Pigments*, 162, pp 704, 2019.
DOI: 10.1016/j.dyepig.2018.10.052
4. Pereira, R. C., Pontinha, A. D. R., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *A Comprehensive Spectral, Photophysical and Electrochemistry Study of Synthetic Water-Soluble Acridones. A New Class of pH and Polarity Sensitive Fluorescent Probes*, *Dyes and Pigments*, 166, pp 203–210, 2019.
DOI: 10.1016/j.dyepig.2019.03.028
5. Gonçalves, L. C. P., Lopes, N. B., Augusto, F. A., Pioli, R. M., Machado, C. O., Freitas-Dörr, B. C., Suffredini, H. B., Bastos, E. L., *Phenolic Betalain as Antioxidants: Meta Means More*, *Pure Appl. Chem.*, AOP, pp AOP, 2019.
DOI: 10.1515/pac-2019-0108
6. Augusto, F. A., Bartoloni, F. H., Cabello, M. C., dos Santos, A. P. F., Baader, W. J., *Kinetic Studies on 2,6-Lutidine Catalyzed Peroxyoxalate Chemiluminescence in Organic and Aqueous Medium: Evidence for General Base Catalysis*, *J. Photochem. Photobiol. A*, 382, pp 111967, 2019.
DOI: 10.1016/j.photochem.2019.111967
7. Rodrigo, M. M., Estesó, M. A., Verissimo, L. M. P., Romero, C. M., Ramos, M. L., Justino, L. L. G., Burrows, H. D., Ribeiro, A. C. F., *Diffusion and structural behaviour of the DL-2-aminobutyric acid*, *J. Chem. Thermodyn.*, 135, pp 60-67, 2019.
DOI: 10.1016/j.jct.2019.03.009
8. Sontag, G., Pinto, M. I., Noronha, J. P., Burrows, H. D., *Analysis of Food by High Performance Liquid Chromatography Coupled with Coulometric Detection and Related Techniques: A Review*, *J. Agric. Food Chem.*, 67, pp 4113-4144, 2019.
DOI: 10.1021/acs.jafc.9b00003
9. Encarnação, T., Pais, A., Campos, M., Burrows, H., *Endocrine disrupting chemicals: Impact on human health, wildlife and the environment*, *Sci. Prog.*, 102, pp 3-42, 2019.
DOI: 10.1177/0036850419826802

10. Knaapila, M., Stewart, B., Garamus, V., Ramos, M., Cruz, P., Brito, R., Justino, L., Fausto, R., Napierala, C., Forster, M., Burrows, H., Scherf, U., *Poly(9-undecyl-9-methyl-fluorene) and poly(9-pentadecyl-9-methyl-fluorene): Synthesis, solution structure, and effect of side chain asymmetry on aggregation behaviour*, *J POLYM SCI POL PHYS*, 57, 2019.
DOI: 10.1002/polb.24838
11. Burrows, H., Hartshorn, R., Weir, R., *The 2019 Nobel Prize in Chemistry*, *Pure Appl. Chem.*, 91, pp 1717, 2019.
DOI: DOI: 10.1515/pac-2019-2922
12. Silva, G. T. M., da Silva, K. M., Silva, C. P., Rodrigues, A. C. B., Oake, J., Gehlen, M. H., Bohne, C., Quina, F. H., *Highly fluorescent hybrid pigments from anthocyanin- and red wine pyranoanthocyanin-analogs adsorbed on sepiolite clay*, *Photochem. Photobiol. Sci.*, 18, pp 1750-1760, 2019.
DOI: 10.1039/C9PP00141G
13. Alves, A. S. S., Cruz, P. F., Brito, R. M. M., Feitosa, E., Antunes, F. E., *Development of sugar based biodegradable nanoencapsulators: Understanding the role of the alcohol injection method on the preparation of aqueous dispersions of sorbitan ester vesicles*, *Journal of Molecular Liquids*, 277, pp 481-487, 2019.
DOI: 10.1016/j.molliq.2018.12.049
14. Singh, P., Magalhães, S., Alves, L., Antunes, F. E., Miguel, M., Lindman, B., Medronho, B., *Cellulose-based edible films for probiotic entrapment*, *Food hydrocolloids*, 88, pp 68-74, 2019.
DOI: 10.1016/j.foodhyd.2018.08.057
15. Baptista, C., Martins, G., Santos, C., Mateus, A., Antunes, F. E., *Microstructure of Thermoplastic Composites Reinforced with Wool and Wood*, *Applied Mechanics and Materials*, 890, pp 98-112, 2019.
DOI: 10.4028/www.scientific.net/AMM.890.98
16. Lamy-Mendes, A., Torres, R. B., Vareda, J. P., Lopes, D., Ferreira, M., Valente, V., Girão, A. V., Valente, A. J. M., Durães, L., *Amine modification of silica aerogels/xerogels for removal of relevant environmental pollutants*, *Molecules*, 24, 3701-3724, 2019.
DOI: 10.3390/molecules24203701
17. Valente, A. J. M., Söderman, O., *Does the solvent properties affect the propensity for self-association of α -cyclodextrin? Insights from NMR self-diffusion*, *J. Mol. Liq.*, 295, pp 111869-75, 2019.
DOI: 10.1016/j.molliq.2019.111869
18. Aguado, R., Murтинho, D., Valente, A. J. M., *A broad overview on innovative functionalized paper solutions*, *Nord. Pulp Pap. Res. J.*, 34, pp 395-416, 2019.
DOI: 10.1515/npprj-2019-0036
19. Verissimo, L. M. P., Utzeri, G., Ramos, M. L., Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., *Limiting diffusion coefficients of glufosinate ammonium, cymoxanil and imidacloprid in aqueous solutions*, *J. Mol. Liq.*, 239, pp 111459-111465, 2019.
DOI: 10.1016/j.molliq.2019.111459

20. Rodrigo, M. M., Esteso, M. A., Veríssimo, L. M. P., Romero, C., Ramos, M. L., Valente, A. J. M., Ribeiro, A. C. F., *A comparative study between the behavior diffusion of α -aminobutyric acid and γ -aminobutyric acid in sodium chloride aqueous solutions*, *J. Mol. Liq.*, 2019, 291, pp 111289-111295, 2019.

DOI: 10.1016/j.molliq.2019.111289

21. Vareda, J. P., Valente, A. J. M., Durães, L., *Assessment of heavy metal pollution from anthropogenic activities and remediation strategies: a review*, *J. Environ. Manage.*, 246, pp. 101-118, 2019.

DOI: 10.1016/j.jenvman.2019.05.126

22. Gonçalves, H. M. R., Pereira, R. F. P., Lepleux, E., Carlier, T., Pacheco, L., Pereira, S., Valente, A. J. M., Fortunato, E., Duarte, A. J., de Zea Bermudez, V., *Nanofluid based on Glucose-derived Carbon Dots Functionalized with [Bmim]Cl for the next generation of smart windows*, *Adv. Sustain. Syst.*, 1900047, 2019.

DOI: 10.1002/adsu.201900047

23. Costa, D., Albuquerque, T., Queiroz, J. A., Valente, A. J. M., *A co-delivery platform based on plasmid DNA peptide-surfactant complexes: formation, characterization and release behaviour*, *Colloids Surf. B Biointerfaces*, 178, pp. 430-438, 2019.

DOI: 10.1016/j.colsurfb.2019.03.029

24. Estrada, F. G. A., Marques, J. M. C., Valente, A. J. M., *Molecular dynamics insights for screening the ability of polymers to remove pesticides from water*, *Chem. Open.* 8, pp. 438-446, 2019.

DOI: 10.1002/open.201800293

25. Matsushita, A. F. Y., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M., *Energy transfer and multicolour tunable emission of Eu,Tb(PSA)Phen composites*, *Colloids Surf. A Physicochem. Eng. Asp.*, 569, pp. 93-101, 2019.

DOI: 10.1016/j.colsurfa.2019.02.049

26. Galindres, D. M., Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., Esteso, M. A., Sanabria, E., Vargas, E. F., Verissimo, L. M. P., Leist, D. G., *Ionic conductivities and diffusion coefficients of alkyl substituted sulfonated resorcinarenes in aqueous solutions*, *J. Chem. Thermodyn.*, 133, pp. 22-228, 2019.

DOI: 10.1016/j.jct.2019.02.018

27. Malagón, A. E., Velásquez, L. F., Galindres, D. M., Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., Verissimo, L. M. P., Esteso, M. A., *Diffusion and conductance properties of aqueous solutions of tetrasodium 5,11,17,23-tetrakisulfonatemethtylen-2,8,14,20-tetra(2-(methylthio)ethyl) resorcinarene*, *J. Mol. Liq.*, 276, pp 897-901, 2019.

DOI: 10.1016/j.molliq.2018.12.007

28. Ribeiro, A. C. F., Barros, Marisa C. F., Verissimo, L., Esteso, M. A., Leist, D. G., *Coupled mutual diffusion in aqueous sodium (salicylate + sodium chloride) solutions at 25 °C*, *J. Chem. Thermodyn.*, 138, pp 282-287, 2019.

DOI: 10.1016/j.jct.2019.06.022.

29. Romero, C. M., Trujillo, G. P., Verissimo, L., Estesó, M. A., Ramos, M. L., Ribeiro, A. C. F., "Limiting diffusion coefficients of α,ω -amino acids in water and in sodium chloride aqueous solutions at 298.15 K", *Eur. Phys. J. E*, 42, pp 94-104, 2019.
DOI: 10.1140/epje/i2019-11856-1.
30. Rodrigo, M. M., Ribeiro, A. C. F., Verissimo, L., Estesó, M. A., Leais, D. G., *Coupled diffusion in aqueous citric acid + calcium citrate solutions*, *J. Chem. Thermodyn.*, 131, pp 314-321, 2019. DOI: 10.1016/j.jct.2018.11.003.
31. Barros, M. C. F., Ribeiro, A. C., Estesó, M. A., *Cyclodextrins in Parkinson's Disease*, *Biomolecules*, 9 (1), pp 3-18, 2019.
DOI: 10.3390/biom9010003
32. Santos, C. I. A. V., Ribeiro, A. C. F., Estesó, M. A., *Drug Delivery Systems: Study of Inclusion Complex Formation between Methylxanthines and Cyclodextrins and Their Thermodynamic and Transport Properties*, *Biomolecules*, 9, 196, pp 1-21, 2019.
DOI: 10.3390/biom9050196
33. Gaponenko, Y., Gousselnikov, V., Santos, C. I. A. V., Shevtsova, V., *Near-Critical Behavior of Fick Diffusion Coefficient in Taylor Dispersion Experiments*, *Microgravity Science and Technology*, 31, pp 475- 2019.
DOI: 10.1007/s12217-019-09736-4
34. Santos, K., Krishnakumar, B., Sobral, A. J. F. N., Koh, J., *Bio-based (chitosan/PVA/ZnO) nanocomposites film: Thermally stable and photoluminescence material for removal of organic dye*, *Carbohydrate Polymers*, 205, pp 559-564, 2019.
DOI: 10.1016/j.carbpol.2018.10.108
35. Muthuvel, K. G., Thirunarayanan, G., Suppuraj, P., Krishnakumar, B., Sobral, A., Swaminathan, M., *Graphene oxide – Fe₂V₄O₁₃ hybrid material as highly efficient hetero-Fenton catalyst for degradation of Methyl Orange*, *International Journal of Industrial Chemistry*, 10, pp 77-87, 2019.
DOI: 10.1007/s40090-019-0173-8
36. Youns, W., Silva, M. R., Krishnakumar, B., Kumar, S., Sobral, A., *Catalytic synthesis of 5-substituted tetrazoles: unexpected reactions and products*, *Journal of Heterocyclic Chemistry*, 56, pp 1613-1621, 2019.
DOI: 10.1002/jhet.3542
37. Murali, S., Kumar, S., Koh, J., Seena, S., Singh, P., Ramalho, A., Sobral, A. J. F. N., *Bio-based chitosan/gelatin/Ag@ZnO bionanocomposites: synthesis and mechanical and antibacterial properties*, *Cellulose*, 26, pp 5347-5361, 2019.
DOI: 10.1007/s10570-019-02457-2
38. Aguiar, A., Farinhas, J., Silva, W., Ghica, M. E., Brett, C. M. A., Morgado, J., Sobral, A. J. F. N., *Synthesis, characterization and application of meso-substituted fluorinated boron dipyrromethenes (BODIPYs) with different styryl groups in organic photovoltaic cells*, *Dyes and Pigments*, 168, pp103-110, 2019.
DOI: 10.1016/j.dyepig.2019.04.031

39. Kumar, S., Mishra, D. K., Sobral, A. J. F. N., Koh, J., *CO₂ adsorption and conversion of epoxides catalyzed by inexpensive and active mesoporous structured mixed-phase (anatase/brookite) TiO₂*, *Journal of CO₂ Utilization*, 34, pp 386-394, 2019.
DOI: 10.1016/j.jcou.2019.07.019
40. Surya, C., John, N. A. A., Pandiyan, V., Ravikumar, S., Amutha, P., Sobral, A. J. F. N., Krishnakumar, B., *Costus speciosus leaf extract assisted CS-Pt-TiO₂ composites: Synthesis, characterization and their bio and photocatalytic applications*, *Journal of Molecular Structure*, 1195, pp 787-795, 2019.
DOI: 10.1016/j.molstruc.2019.06.030
41. Henriques, J., Sousa, J., Veiga, F., Cardoso, C., Vitorino, C., *Process analytical technologies and injectable drug products: is there a future?*, *International Journal of Pharmaceutics*, 554, pp 21-35, 2019.
DOI: 10.1016/j.ijpharm.2018.10.070
42. Ana, R., Mendes, M., Sousa, J. J., Pais, A., Falcão, A., Fortuna, A., Vitorino, C., *Rethinking polymer-lipid hybrid nanoparticles for brain delivery*, *International Journal of Pharmaceutics* 554, pp 352-365, 2019.
DOI: 10.1016/j.ijpharm.2018.11.028.
43. Miranda, M., Rosete, M. T., Vitorino, C., Cabral, C., *Nanostructuring lipid carriers using *Ridolfia segetum* (L.) Moris essential oil*, *Materials Science and Engineering C: Materials for Biological Applications*, 103, 109804, 2019
<https://doi.org/10.1016/j.msec.2019.109804>
44. Barone, A., Mendes, M., Cabral, C., Mare, R., Paolino, D., Vitorino, C., *Hybrid nanostructured films for topical administration of simvastatin as coadjuvant treatment of melanoma*, *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 2019
DOI: 10.1016/j.xphs.2019.06.002
45. Simões, A., Veiga, F., Vitorino, C., *Developing cream formulations: renewed interest in an old problem*, *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 2019
<https://doi.org/10.1016/j.xphs.2019.06.006>
46. Vitorino, C., Silva, S., Bicker, J., Falcão, A., Fortuna, A., *Antidepressants and nose-to-brain delivery: drivers, restraints, opportunities and challenges*, *Drug Discovery Today*, 2019
<https://doi.org/10.1016/j.drudis.2019.06.001>
47. Henriques, J., Cardoso, C., Vitorino, C., *On demand for new process analytical technologies applied to injectable drug products*, *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, 137, 104975, 2019.
DOI: 10.1016/j.ejps.2019.104975
48. Silva, J., Basso, J., Sousa, J., Fortuna, A., Vitorino, C., *Development and full validation of an HPLC methodology to quantify atorvastatin and curcumin after their intranasal co-delivery to mice*, *Biomedical Chromatography*, e4621, 2019.
<https://doi.org/10.1002/bmc.4621>

49. Margarida M., Pais, A., Cardoso, C., Vitorino, C., *aQbD as a platform for IVRT method development - a regulatory oriented approach*, *International Journal of Pharmaceutics*, 572, 118695, 2019.
DOI: 10.1016/j.ijpharm.2019.118695
50. Miranda, M., Cardoso, C., Vitorino, C., *Quality and Equivalence of Topical Products: A Critical Appraisal*, *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, 105082, 2019.
DOI: 10.1016/j.ejps.2019.105082.
51. Cova, T. F. G. G., Pais, A. A. C. C., *Deep learning for deep Chemistry: optimizing the prediction of chemical patterns*, *Front. Chem. - Theoretical and Computational Chemistry*, 7, 809, 2019.
DOI: 10.3389/fchem.2019.00809
52. Aviñó, A., Jorge, A. F., Huertas, C. S., Cova, T. F. G. G., Pais, A. A. C. C., Lechuga, L. M., Eritja, R., Fabrega, C., *Aptamer-peptide conjugates as a new strategy to modulate human α -thrombin binding affinity*, *Biochim. Biophys. Acta Gen. Subj.*, 863, pp 1619-1630, 2019.
DOI: 10.1016/j.bbagen.2019.06.014
53. Cova, T. F. G. G., Bento, D. J., Nunes, S. C. C., *Computational Approaches in Theranostics: Mining and Predicting Cancer Data*, *Pharmaceutics*, 11, pii E119, 2019.
DOI: 10.3390/pharmaceutics11030119
54. Cova, T. F. G. G., Milne, B. F., Pais A. A. C. C., *Host flexibility and space filling in supramolecular complexation of cyclodextrins: A free-energy-oriented approach*, *Carbohydr. Polym.*, 205, pp 42-54, 2019.
DOI: 10.1016/j.carbpol.2018.10.009
55. Gaspar, M. C., Pais, A. A. C. C., Sousa, J. J. S., Brillaut, J., Olivier, J. C., *Development of levofloxacin-loaded PLGA microspheres of suitable properties for sustained pulmonary release*, *International journal of pharmaceutics* 556, pp 117-124, 2019.
DOI: 10.1016/j.ijpharm.2018.12.005.
56. Fonseca, D. A., Ferreira, M., Campos, M. G., Antunes, P. E., Antunes, M. J., Cotrim, M. D., *Vascular effects of a polyphenolic fraction from *Oxalis pes-caprae* L.: role of α -adrenergic receptors Sub-types*, *Natural Product Research*, 30, pp 1-4, 2019.
DOI:10.1080/14786419.2018.1564291
57. Paula, V., Delgado, T., Campos, M. G., Anjos, O., Estevinho, L. M., *Enzyme Inhibitory Potential of *Ligustrum lucidum* Aiton Berries*, *Molecules*, 24(7), pp 1283-1290, 2019.
DOI: 10.3390/molecules24071283
58. Vieira, F. E., Lucas, F., Campos, M. G., Germano, C., *Mururé (*Brosimum acutifolium* Huber) in the treatment of syphilis in the colonial Amazon: From historical data to the actual contribution in treatment*, *Acta Botanica Brasílica*. 33(2), pp 183-190, 2019.
DOI: 10.1590/0102-33062019abb0030

59. De Souza, B. T., Caeiro, A., Santos, S. A., Zaluski, R., Shinohara, A. J., Lima, G. P. P., Campos, M. G., Junior, L. A. J., Orsi, R. O., *Flavonoid content in bee bread suffers seasonal variation and affects hypopharyngeal gland development in Apis mellifera honey bees*, *J. Apic Research* 20, pp 1-8, 2019.

DOI: 10.1080/00218839.2019.1702321

60. Bakour, M., Campos, M. G., Imtara, H., Lyoussia, B., *Antioxidant content, free radical scavenging activity and identification of Phenolic/Flavonoid compounds in pollen of fourteen plants using HPLC-DAD analysis*, *J. Apic Research*, 20, 2019.

DOI: 10.1080/00218839.2019.1675336

61. Cornea-Cipcigan, M., Pamfil, D., Stan, C. P., Mărgăoan, R., Campos, M. G., *Cyclamen Species Review: Transcription Factors Vs. Pharmacological Effects*, *Acta Poloniae Pharmaceutica - Drug Research*, 76 (6), pp 919-938, 2019.

DOI: 10.32383/appdr/111762

62. Perpétuo, N. C., Coutinho, A. P., Campos, M. G., Trincão, P. R., *Brief history of plant toxicology: some uses of toxic plants over time*, *História da Ciência e Ensino*, 20: 1-6, 2019.

DOI: 10.23925/2178-2911.2017v15p1-6

63. Xin, Q., Kwon, M-J., Lee, J-W., Kim, K. S., Hao, C. H., Campos, M. G., Tundis, R., Cui C-B., Cho, Y. H., Cao H., *Gamma Irradiated Rhodiola sachalinensis Extract Ameliorates Testosterone-Induced Benign Prostatic Hyperplasia by Downregulating 5-Alpha Reductase and Restoring Testosterone in Rats*, *Molecules*, 24, pp 3981-3990, 2019.

DOI: 10.3390/molecules24213981

64. Mărgăoan, R., Stranț, M., Varadi, A., Topal, E., Yücel, B., Cornea-Cipcigan, M., Campos, M. G., Vodnar, D. C., *Bee Pollen and Bee Bread: Bioactive Constituents and Health Benefits*, *Antioxidants*, 8, 568, pp 1-40, 2019.

DOI: 10.3390/antiox8120568

65. Sajadimajd, S., Bahramsoltani, R., Iranpanah, A., Kumar Patra, J., Das, G., Gouda, S., Rahimi, R., Rezaeihamiri, E., Cao, H., Giampieri, F., Battino, M., Tundis, R., Campos, M. G., Farzaei, M. H., Xiao, J., *Advances on Natural Polyphenols as Anticancer Agents for Skin Cancer*, *Pharmacological Research*, 151, pp 104584, 2019.

DOI: 10.1016/j.phrs.2019.104584

66. Bartolomei, M., Pirani, F., Marques, J. M. C., *Aggregation enhancement of coronene molecules by seeding with alkali-metal ions*, *Phys. Chem. Chem.*, 21, pp 16005-16016, 2019.

DOI: 10.1039/C9CP02658D

67. Jesus, W. S., Prudente, F. V., Marques, J. M. C., *Microsolvation of Li⁺ in a Mixture of Argon and Krypton: Unveiling the Most Stable Structures of the Clusters*, *J. Phys. Chem. A*, 123, pp 2867-2873, 2019.

DOI: 10.1021/acs.jpca.9b00960

68. Jesus, W. S., Marques, J. M. C., Prudente, F. V., Pereira, F. B., *Exploring the first-shell and second-shell structures arising in the microsolvation of Li⁺ by rare gases*, *Int. J. Quantum Chem.*, 119, pp e25860, 2019.
DOI: 10.1002/qua.25860
69. Pereira, F. B., Lourenço, N., Jesus, W. S., Prudente, F. V., Marques, J. M. C., *Discovering low-energy atomic clusters with machine learning*, *Eur. J. Clin. Invest.*, 49 (Suppl. 1), 41 (S5-L6), 2019.
DOI: 10.1111/eci.13107
70. Vitorino, C., Silva, S., Bicker, J., Carona, A., Falcão, A., Fortuna, A., *Designing lipid nanoparticles for intranasal delivery of antidepressants*, *Drug Delivery to the Lungs*, 30, pp. 71-74, 2019.
ISBN: 978-0-9957688-2-6
71. Gonçalves, J., Silva, S., Vitorino, C., Alves, G., Fortuna, A., *How does the device determine nose-to-brain drug delivery to mice?*, *Drug Delivery to the Lungs*, 30, pp. 166-169, 2019.
ISBN: 978-0-9957688-2-6
72. Balakrishna, A., Aguiar, A., Sobral, P. J. M., Wani, M. Y., Silva, J. A., Sobral, A. J. F. N., *Paal-knorr synthesis of pyrroles: From conventional to green synthesis*, *Catalysis Reviews-Science and Engineering*, 61, pp 84-110, 2019.
DOI: 10.1080/01614940.2018.1529932
73. Grosso, C., Lieber, M., Brigas, A. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., Lemos, A., *Regioselectivity in Hetero-Diels-Alder Reactions*, *J. Chem. Educ.*, 96, 148-152, 2019.
DOI: 10.1021/acs.jchemed.7b00933
74. Nascimento, B. F. O., Pereira, N. A. M., Valente, A. J. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Pineiro, M., *A review on (hydro)porphyrin-loaded polymer micelles: interesting and valuable platforms for enhanced cancer nanotheranostics*, *Pharmaceutics*, 11(2), 81, 2019.
DOI: 10.3390/pharmaceutics11020081
75. Jorda, R., Lopes, S. M. M., Řezníčková, E., Ajani, H., Pereira, A. V., Gomes, C. S. B., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridine-fused steroids and their in vitro biological evaluation in prostate cancer*, *Eur. J. Med. Chem.*, 178, 168-176, 2019.
DOI: 10.1016/j.ejmech.2019.05.064
76. Panice, M. R. P., Lopes, S. M. M., Figueiredo, M. C., Ruiz, A. L. T. G., Foglio, M. A., Sarragiotto, M. H., Pinho e Melo, T. M. V. D., *New 3-Tetrazolyl- β -Carbolines and β -Carboline-3-Carboxylates with Anti-Cancer Activity*, *Eur. J. Med. Chem.*, 179, 123-132, 2019.
DOI: 10.1016/j.ejmech.2019.05.085
[Featured on The ISHC Bulletin, *Recent Publications of ISHC Members*, Issue 34, August 2019]
77. Grosso, C., Brigas, A., de los Santos, J. M., Palacios, F., Lemos, A., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Natural Deep Eutectic Solvents in the Hetero-Diels-Alder Approach to Bis(indolyl)methanes*, *Monatshefte für Chemie - Chemical Monthly*, 150, 1275-1288, 2019.
DOI: 10.1007/s00706-019-02421-7

78. Irimia, R. E., Lopes, S. M. M., Sotes, G., Cavieres, L. A., Eren, Ö., Lortie, C. J., French, K., Hierro, J. L., Rosche, C., Callaway, R. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Montesinos, D., *Biogeographic differences in the allelopathy of leaf surface extracts of an invasive weed, Biological Invasions*, 21, 3151-3168, 2019.

DOI: 10.1007/s10530-019-02038-1]

79. Soares, M. I. L., Gomes, C. S. B., Nunes, S. C. C., Pais, A. A. C. C., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Phosphane-Catalyzed [3+2] Annulation of Allenolates with 3-Nitro-2H-chromenes: Synthesis of Tetrahydrocyclopenta[c]chromenes, Eur. J. Org. Chem.*, 5441-5451, 2019.

DOI: 10.1002/ejoc.201900564

80. Nascimento, B. F. O., Laranjo, M., Pereira, N. A. M., Ferreira, J. D., Piñeiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Ring-fused diphenylchlorins as potent photosensitizers for PDT applications: in vitro tumour cell biology and in vivo chick embryo CAM studies, ACS Omega*, 4, 17244-17250, 2019.

DOI: 10.1021/acsomega.9b01865

81. Brandão, P., Piñeiro, M., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Flow Chemistry: Towards a More Sustainable Heterocyclic Synthesis, Eur. J. Org. Chem.*, 7188-7217, 2019.

DOI: 10.1002/ejoc.201901335

[Cover Feature: *Flow Chemistry: Towards A More Sustainable Heterocyclic Synthesis, Eur. J. Org. Chem.*, 43, 2019.

DOI: 10.1002/ejoc.201901638]

82. Nascimento, B. F. O., Lopes, S. M. M., Piñeiro, M., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Current Advances in the Synthesis of Valuable Dipyrromethane Scaffolds: Classic and New Methods, Molecules*, 24, 4348, 2019.

[Cover Picture – <https://www.mdpi.com/1420-3049/24/23>]

DOI: 10.3390/molecules24234348.

83. Soares, M. I. L., Lopes, S. M. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., *One-pot Diastereoselective Synthesis of Chiral Tricyclic L-Cysteine and D-penicillamine Derivatives: A Laboratory Experiment, Química Nova*, in press, 2019.

DOI: 10.21577/0100-4042.20170448

84. Alves, A. J. S., Alves, N. G., Caratão, C. C., Esteves, M. I. M., Fontinha, D., Bártolo, I., Soares, M. I. L., Lopes, S. M. M., Prudêncio, M., Taveira, N., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Spiro-Lactams as Novel Antimicrobial Agents, Curr. Top. Med. Chem.*, 2019.

DOI: 10.2174/1568026619666191105110049

85. Alves, C., Grosso, C., Barrulas, P., Paixão, J. A., Cardoso, A. L., Burke, A. J., Lemos, A., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Asymmetric Neber Reaction in the Synthesis of Chiral 2-(Tetrazol-5-yl)-2H-Azirines, Synlett*, aceite para publicação, 2019.

DOI: 10.1055/s-0039-1691533

86. Gomes, C., Peixoto, M., Pineiro, M., *Porphyrim synthesis using mechanochemistry: sustainability assessment, J. Porphy. Phthalocyan.*, 23, 889-897, 2019.

DOI: 10.1142/S1088424619500755

87. Brandão, P., Pinheiro, D., Seixas de Melo, J. S., Pineiro, M., *I₂/NaH/DMF as oxidant trio for the synthesis of tryptanthrin from Indigo or Isatin, Dyes and Pigments*, 173, 107935, 2020. DOI: 10.1016/j.dyepig.2019.107935
88. Cardoso, A. L., Soares, M. I. L., *1,3-Dipolar Cycloadditions Involving Allenes: Synthesis of Five-Membered Rings, Curr. Org. Chem.*, 2019, Special Issue on “The Chemistry of Allenes” (Article E-pub Ahead of Print). DOI: 10.2174/1385272823666191203122959
89. Bezerra, F., Simões, C. J. V., Beirão, J. M., Saraiva, M. J., Brito, R. M. M., Almeida, M. R. *Targeting transthyretin amyloidosis in the eye with next-generation stabilizers: AT40 displays potent TTR stabilization in the human vitreous. Amyloid*, 26(sup1), pp. 73–74, 2019. DOI: 10.1080/13506129.2019.1583193
90. Bornes, B., Sardo, M., Lin, Z., Amelse, J., Fernandes, A., Ribeiro, M. F., Geraldes, C. F. G. C., Rocha, J., Mafra, L., *¹H-³¹P HETCOR NMR elucidates the nature of acid sites in zeolite HZSM-5 probed with trimethylphosphine oxide, Chemical Communications*, 55, pp. 12635-12638, 2019. DOI: 10.1039/c9cc06763a.
91. Carvalho, J., Alves, S., Castro, M. M. C. A., Geraldes, Carlos F. G. C., Queiroz, J. A., Fonseca, C. P., Cruz, C., *Development of a bioreactor system for cytotoxic evaluation of pharmacological compounds in living cells using NMR spectroscopy, Journal of Pharmacological and Toxicological Methods*, 95, pp. 70–78, 2019. DOI: 10.1016/j.vascn.2018.11.004.
92. Cerofolini, L., Silva, J. M., Ravera, E., Romanelli, M., Geraldes, C. F. G. C., Macedo, A. L., Fragai, M., Parigi, G., Luchinat, C., *How do nuclei couple to the magnetic moment of a paramagnetic center? A new theory at the gauntlet of the experiments, Journal of Physical Chemistry Letters*, 10, pp. 3610-3614, 2019. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.9b01128.
93. Filipe, H. A. L., Pokorná, Š., Hof, M., Amaro, M., Loura, L. M. S., *Orientation of nitro-group governs the fluorescence lifetime of nitrobenzoxadiazole (NBD)-labeled lipids in lipid bilayers, Physical Chemistry Chemical Physics*, 21, pp. 1682-1688, 2019. DOI: 10.1039/c8cp06064a
94. Martins, P. A. T., Domingues, N., Pires, C., Alves, A. M., Palmeira, T., Samelo, J., Cardoso, R., Velazquez-Campoy, A., Moreno, M. J., *Molecular crowding effects on the distribution of amphiphiles in biological media. Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, 180, pp. 319-325, 2019. DOI: 10.1016/j.colsurfb.2019.04.065
95. Metelo, A. M., Arias-Ramos, N., Lopez-Larrubia, P., Castro, M. M. C. A., *Metabolic effects of VO(dmpp)₂ – an ex-vivo ¹H-HRMAS NMR study to unveil its pharmacological properties, New Journal of Chemistry*, 43, pp 17841-17849, 2019. DOI: 10.1039/c9nj02491c

96. Neves, M. C., Filipe, H. A. L., Reis, R. L., Prates Ramalho, J. P., Coreta-Gomes, F., Moreno, M. J., Loura, L. M. S., *Interaction of Bile Salts With Lipid Bilayers: An Atomistic Molecular Dynamics Study*, *Frontiers in Physiology*, 10, pp. 393, 2019
DOI: 10.3389/fphys.2019.00393
97. Pereira, M. I. A., Pereira, G., Geraldes, C. F. G. C., Cabral Filho, P. E., Cesar, C. L., de Thomaz, A. A., Santos, B. S., Pereira, G. A. L., Fontes, A., *Hydrophilic Quantum Dots Functionalized with Gd(III)-DOTA chelates as Bright and Effective T1-weighted Bimodal Nanoprobos*, *Scientific Reports*, 9, pp. 2341, 2019.
DOI: 10.1038/s41598-019-38772-8
98. Pinho, S. L. C., Sereno, J., Abrunhosa, A. J., Delville, M.-H., Rocha, J., Carlos, L. D., Geraldes, C. F. G. C., *Gd- and Eu-Loaded Iron Oxide@Silica Core-Shell Nanocomposites as Trimodal Contrast Agents for Magnetic Resonance Imaging and Optical Imaging*, *Inorg. Chem.*, 58, pp. 16618–16628, 2019.
DOI: 10.1021/acs.inorgchem.9b02655
99. Silva, J. P., Cerofolini, L., Giuntini, S., Calderone, V., Geraldes, C. F. G. C., Macedo, A. L., Parigi, G., Fragai, M., Ravera, E., Luchinat, C., *Metal centers in biomolecular solid-state NMR*, *Journal of Structural Biology*, 206, pp. 99-109, 2019.
DOI: 10.1016/j.jsb.2018.11.013
100. Silva, J. M., Giuntini, S., Cerofolini, L., Geraldes, C. F. G. C., Macedo, A. L., Ravera, E., Fragai, M., Ravera, E., Luchinat, C., Calderone, V., *Metal coordination in metalloprotein crystals: the 'Jahn-Teller' and the 'Butterfly' Effects*, *Journal of Biological Inorganic Chemistry*, 24, pp. 91–101, 2019.
DOI: 10.1007/s00775-018-1630-0.
101. Simões, C. J. V., Almeida, Z. L., Cardoso, A., L., Bezerra, F., Almeida, M. R., Beirão, J., Pinho e Melo, T. M. V. D., Saraiva, M. J., Brito, R. M. M., *Lead optimization of resilient next-generation transthyretin stabilizers for multiple target-product profiles: approaching the CNS. Amyloid*, 26(sup1), pp. 77-78. 2019.
DOI: 10.1080/13506129.2019.1583195
102. Trigueiro-Louro, J. M., Correia, V., Santos, L. A., Guedes, R. C., Brito, R. M. M., Rebelo-de-Andrade, H. *To hit or not to hit: Large-scale sequence analysis and structure characterization of influenza A NS1 unlocks new antiviral target potential. Virology*. 535, pp. 297-307. 2019.
DOI: 10.1016/j.virol.2019.04.009.
103. Ivanov, M. S., Silibin, M. V., Khomchenko, V. A., Nikitin, T., Kalinin, A. S., Karpinsky, D. V., Bdikin, I., Polyakov, V. V., Fausto, R., Paixão, J. A., *The Discovery of Electrochemical Contribution to Local Electromechanical Response in P(VDF-TrFe)/LiNbO₃*, *Appl. Surf. Sci.*, 470, pp 1093-1100, 2019.
DOI: 10.1016/j.apsusc.2018.11.213

104. Unsalan, O., Jenniskens, P., Yin, Q.-Z., Kaygisiz, E., Albers, J., Clark, D. L., Granvik, M., Demirkol, I., Erdogan, I. Y., Bengu, A. S., Özel, M. E., Terzioglu, Z., Gi, N., Brown, P., Yalcinkaya, E., Temel, T., Prabhu, D. K., Robertson, D. L. K., Boslough, M., Ostrowski, D. R., Kimberley, J. E. S., Rowland, D. J., Bryson, K. L., Altunayar, C., Rangelov, B., Karamanov, A., Tatchev, D., Kocahan, Ö., Oshtrakh, M. I., Maksimova, A. A., Karabanalov, M. S., Verosub, K. L., Levin, E., Uysal, I., Hoffmann, V., Hiroi, T., Reddy, V., Ildiz, G. O., Bolukbasi, O., Zolensky, M. E., Hochleitner, R., Kaliwoda, M., Öngen, S., Fausto, R., Nogueira, B. A., Chukin, A. V., Karashanova, D., Semionkin, V. A., Yeşiltaş M., Glotch, T., Yilmaz, A., Friedrich, J. M., Sanborn, M. E., Huyskens, M., Ziegler, K., Williams, C. D., Schönbacher, M., Bauer, K., Meier, M. M., Maden, C., Busemann, H., Welten, K. C., Caffee, M. W., Laubenstein, M., Zhou, Q., Li, Q.-L., Li, X.-H., Liu, Y., Tang, G.-Q., Sears, D. W. G., McLain, H. L., Dworkin, J. P., Elsilá, J. E., Glavin, D. P., Schmitt-Kopplin, P., Ruf, A., Schmedemann N., *The Sariçiçek Howardite Fall in Turkey: Source Crater of HED Meteorites on Vesta and Impact Risk of Vestoids, Meteoritics and Planet. Sci.*, 54, pp 953-1008, 2019.

DOI: 10.1111/maps.13258

105. Lopes, S., Fausto, R., Khriachtchev, L., *Formic Acid in Deuterium and Hydrogen Matrices, Mol. Phys.*, 2019.

DOI: 10.1080/00268976.2018.1548716

106. Ildiz, G. O., Celik, O., Atak, C., Yilmaz, A., Kabuk, H. N., Kaygisiz, E., Ayan, A., Meriç, S., Fausto, R., *Raman Spectroscopic and Chemometrics Investigation of Lipid/Protein Ratio Contents of Soybean Mutants, Appl. Spectrosc.*, 2019.

DOI: 10.1177/0003702819859940

107. Golbedaghi, R., Justino, L. L. G., Fausto, R., Safarabadi, S., Alvandi, M., *A Multi-Technique Investigation of a New Macroacyclic Schiff Base Ligand and its Dinuclear Cd(II), Cu(II) and Zn(II) Complexes, Inorg. Chim. Acta*, 495, Art. 118941, pp 1-10, 2019.

DOI: 10.1016/j.ica.2019.05.040

108. Lopes, S., Nikitin, T., Fausto, R., *Propiolic Acid in Solid Nitrogen: NIR- and UV-Induced cis→trans Isomerization and Matrix-Site Dependent trans→cis Tunneling, J. Chem. Phys.*, 123, pp 1581-1593, 2019.

DOI: 10.1021/acs.jpca.8b11319

109. Ildiz, G. O., Kabuk, H. N., Kaplan, E. S., Halimoglu, G., Fausto, R., *A Comparative Study of the Yellow Dent and Purple Flint Maize Kernel Components by Raman Spectroscopy and Chemometrics, J. Mol. Struct.*, 1184, pp 246-253, 2019.

DOI: 10.1016/j.molstruc.2019.02.034

110. Ismael, A., Abe, M., Fausto, R., Cristiano, M. L. S., *Insights into the Photochemistry of 5-Aminotetrazole Derivatives with Applications in Coordination Chemistry. Effect of the Saccharyl moiety on the Photostability, Pure & Appl. Chem.*, 2019.

DOI: 10.1515/pac-2019-0402

111. Lamsaf, H., Elghadraoui, E. H., Fausto, R., Oulmekki, A., Costa, B. F. O., *Synthesis, Structural Studies and Magnetic Properties of a New Mixed-Valence diphosphate: Zn²⁺₅Fe³⁺₂(P₂O₇)₄, J. Supercond. Nov. Magnet.*, 2019.

DOI: 10.1007/s10948-019-05263-w

112. Lapinski, L., Reva, I., Rostkowska, H., Lopes Jesus, A. J., Pinto, S. M. V., Fausto, R., Nowak, M. J., *Conformational Isomerizations by Rotation Around C-C or C-N Bonds: A Comparative Study on Matrix-isolated Glycolamide and N-Hydroxyurea Excited with Near-IR Laser Light*, *J. Phys. Chem. A*, 123, pp 3831-3839, 2019.

DOI: 10.1021/acs.jpca.9b01992

113. Lopes Jesus, A. J., Nunes, C. M., Reva, I., Pinto, S. M. V., Fausto, R., *The Effects of Entangled IR-Radiation and Tunneling on the Conformational Interconversion of 2-Cyanophenol*, *J. Phys. Chem. A*, 123, pp 4396-4405, 2019.

DOI: 10.1021/acs.jpca.9b01382

114. Nunes, C. M., Eckhardt, A. K., Reva, I., Fausto, R., Schreiner, P. R., *Competitive Nitrogen versus Carbon Tunneling*, *J. Am. Chem. Soc.*, 141, pp 14340-14348, 2019.

DOI: 10.1021/jacs.9b06869.

115. Ildiz, G. O., Fausto, R., *Photoinduced UV Degradation of Matrix-Isolated 3-Chlorobenzaldehyde*, Proceedings of the 635th ISER International Conference on Chemical and Environmental Science, Phuket, Thailand, pp 1-5, 2019.

DOI: Not available.

116. Ildiz, G. O., Konarska, J., Fausto, R., *UV-Induced Conformational Isomerization and Photochemistry of 3-Chloro-4-methoxybenzaldehyde in Cryogenic Inert Matrices*, *J. Chem. Phys.*, 151, Art. 104303-(1-10), 2019.

DOI: 10.1063/1.5118332

117. Góbi, S., Nunes, C. M., Reva, I., Tarczay, G., Fausto, R., *S-H Rotamerization via Tunneling in a Thiol Form of Thioacetamide*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 21, pp 17063-17071, 2019.

DOI: 10.1039/c9cp03417j

118. Nowak, M. J., Reva, I., Lopes Jesus, A. J., Lapinski, L., Fausto, R., *UV-Promoted Radical Formation, and Near-IR-induced and Spontaneous Conformational Isomerization in Monomeric 9-Methylguanine Isolated in Low-Temperature Ar Matrices*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 21, pp 22857-22868, 2019. – Chosen as **HOT ARTICLE**.

DOI: 10.1039/c9cp04487f

119. Nunes, C. M., Reva, I., Fausto, R., *Conformational Isomerization Triggered by Vibrational Excitation of a Second Stretching Overtone*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 21, pp 24993-25001, 2019. – Chosen as **HOT ARTICLE**.

DOI: 10.1039/c9cp05070a

120. Góbi, S., Reva, I., Csonka, I., Nunes, C. M., Tarczay, G., Fausto, R., *Conformational Control over Thiol Forms of Thioacetamide by Selective Excitation of NH Imino Vibrational Antennas*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 21, pp 24935-14949, 2019. – Chosen as **HOT ARTICLE**.

DOI: 10.1039/c9cp05370k

121. Lopes Jesus, A. J., Reva, I., Nunes, C. M., Roque, J. P. L., Pinto, S. M. V., Fausto, R., *Conformational Changes in Matrix-Isolated 2-Isocyanophenol: Vibrational Excitation and Spontaneous Tunneling*, *Chem. Phys. Lett.*, 2019.

DOI: 10.1016/j.cplett.2019.137069

122. Koleżyński, A., Dorosz, D., Ryczkowsk, J., Fausto, R., *A Collection of Selected Contributions to the XIVth International Conference on Molecular Spectroscopy (ICMS 2017)*, *J. Mol. Struct.*, 1182, 292-293, 2019.
DOI: 10.1016/j.molstruc.2019.01.066
123. Ildiz, G. O., Schmitt, M., Fausto, R., *Molecular Spectroscopy and Molecular Structure – A Collection of Contributions Presented at the 34th European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS 2018)*, *J. Mol. Struct.*, 1195, 555, 2019.
DOI: 10.1016/j.molstruc.2019.05.135
124. Simão, A., Cabezas, C., León, I., Alonso, E. R., Mata, S., Alonso, J. L., *Elucidating the Multiple Structures of Pipercolic Acid by Rotational Spectroscopy*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 21 pp. 4155–4161, 2019.
DOI: 10.1039/C8CP06120C
125. Benali, A., Melo, B. M. G., Prezas, P. R., Bejar, M., Dhahri, E., Valente, M. A., Graça, M. P. F., Nogueira, B. A., Costa, B. F. O., *Structural, Morphological, Raman and AC Electrical Properties of the Multiferroic Sol-Gel Made $\text{Bi}_{0.8}\text{Er}_{0.1}\text{Ba}_{0.1}\text{Fe}_{0.96}\text{Cr}_{0.02}\text{Co}_{0.02}\text{O}_3$ material*, *J. Alloy. Compd.*, pp 304-315, 2019.
DOI: 10.1016/j.jallcom.2018.10.142
126. Kumar, G., Kumar, R., Ildiz, G. O., Fausto, R., Husain, A., *Structure, Spectroscopic Properties and Catalytic Activity for Epoxide Ring-Opening of Nickel Methylxanthate*, *J. Mol. Struct.*, 1177, pp 33-46, 2019.
DOI: 10.1016/j.molstruc.2018.09.034
127. Aroso R. T., Calvete M. J. F., Pucelik B., Dubin G., Arnaut L. G., Dąbrowski J. M., Pereira M. M., *“Photoinactivation of microorganisms with sub-micromolar concentrations of imidazolium metallophthalocyanine salts”*. *Eur. J. Med. Chem.*, 184, 111740, 2019.
DOI: 10.1016/j.ejmech.2019.111740
128. Avadanei, M., Pina, J., Serpa, C., Tigoianu, R., Cozan, V., *Photochromic Cycle of Two N-Salicylidene-p-X-Anilines Revealed by the Dynamics over 10 Orders of Magnitude*, *J. Mol. Liq.*, 283, pp 617-629, 2019.
DOI: 10.1016/j.molliq.2019.03.130
129. Calvete, M. J. F., Piccirillo, G., Vinagreiro, C. S., Pereira, M. M., *Hybrid materials for heterogeneous photocatalytic degradation of antibiotics*, *Coord. Chem. Rev.*, 395, pp 63-85, 2019.
DOI: 10.1016/j.ccr.2019.05.004.
130. Ciciliati, M. A., Eusébio, M. E. S., Ramos Silva, M., Cavalheiro, E. T. G., Castro, R. A. E., *Metoprolol: solid forms of a top selling antihypertensive*, *CrystEngComm*, 21, pp 4319-4328, 2019.
DOI: 10.1039/c9ce00700h

131. Dias, L. D., Batista de Carvalho, A. L., Pinto, S. M., Aquino, G. L. B. A., Calvete, M. J. F., Rossi, L. M., Marques, M. P., Pereira, M. M., *Bioinspired-Metalloporphyrin Magnetic Nanocomposite as a Reusable Catalyst for Synthesis of Diastereomeric (-)-Isopulegol Epoxide: Anticancer Activity Against Human Osteosarcoma Cells (MG-63)*, *Molecules*, 24, pp 52, 2019.

DOI: 10.3390/molecules24010052

132. Donohoe, C., Senge, M. O., Arnaut, L. A., Gomes-da-Silva, L. C., "Cell death in photodynamic therapy: From oxidative stress to anti-tumor immunity." *Biochim Biophys Acta Rev Cancer*. 2019 Dec;1872(2):188308.

DOI: 10.1016/j.bbcan.2019.07.003.

133. Évora, A. O. L., Castro, R. A. E., Maria, T. M. R., Silva, M. R., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., *Lamotrigine: Design and synthesis of new multicomponent solid forms*, *Eur. J. Pharm. Sci.*, 129, pp 148-162, 2019.

DOI: 10.1016/j.ejps.2019.01.007

134. Figueiredo, A. S., Queiroz, J. E., Dias, L. D., Vidal, H. D., Machado, I. V., Vila Verde, G. M., Aquino, G. L. B. *Synthesis and Anticholinesterase Activity Evaluation of Asymmetric Azines*, *Pharm. Chem. J.*, 53, pp 544-549, 2019.

DOI: 10.1007/s11094-019-02035-7

135. Holanda, B. B. C., Bannach, G., Ramos Silva, M., Eusébio, M. E. S., Castro, R. A. E., *Polymorphism of gemfibrozil: Investigation by thermal and spectroscopic methods*, *Thermochim. Acta*, pp 113-118, 2019.

DOI: 10.1016/j.tca.2019.03.026

136. Holanda, B. B. C., Alarcon, R. T., Gaglieri, C., Souza, A. R. de, Castro, R. A. E., Rosa, P. C. P., Tangerino, D. J. A., Bannach, G., *Thermal studies, degradation kinetic, equilibrium solubility, DFT, MIR, and XRPD analyses of a new cocrystal of gemfibrozil and isonicotinamide*, *J. Therm. Anal. Calorim.*, 136, pp 2049–2062, 2019.

DOI: 10.1007/s10973-018-7873-8

137. Khurana, B., Gierlich, P., Meindl, A., Gomes-da-Silva, L. C., Senge, M. O., "Hydrogels: soft matters in photomedicine." *Photochem Photobiol Sci*. 2019 Nov 1;18(11): 2613-2656.

DOI: 10.1039/c9pp00221a.

138. Maria, T. M. R., Rosado, M. T. S., Oliveira, M. F. O., Bebiano, S. S., Castro, R. A. E., Juszyńska-Gałązka, E., Silva, M. R., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., *Polymorphism of 1,3-cyclohexanediols. Molecular structure and plastic crystal formation of cyclohexanediol isomers*, *CrystEngComm.*, 21, pp 3395-3408, 2019.

DOI: 10.1039/C9CE00186G

139. Mazivila, S. J., Castro, R. A. E., Leitão, J. M. M., Esteves da Silva, J. C. G., *At-line green synthesis monitoring of new pharmaceutical co-crystals lamivudine: theophylline polymorph I and II, quantification of polymorph I among its APIs using FT-IR spectroscopy and MCR-ALS*, *J. Pharm. Biomed. Anal.*, 169, pp 235–244, 2019.

DOI: 10.1016/j.jpba.2019.03.014

140. Mazivila, S. J., Castro, R. A. E., Leitão, J. M. M., Esteves da Silva, J. C. G., *At-line monitoring of salification process of the antiretroviral lamivudine-saccharinate salt using FT-MIR spectroscopy with multivariate curve resolution*, *Vibr. Spectrosc.*, 106, pp 102992, 2019.
DOI: 10.1016/j.vibspec.2019.102992
141. Monteiro, C. J. P., Jesus, P., Davies, M. L., Ferreira, D., Arnaut, L. G, Gallardo, I., Pereira, M. M., Serpa, C., *Control of the Distance between Porphyrin Sensitizers and TiO₂ Surface in Solar Cells by Designed Anchoring Groups*, *J. Mol. Struct.*, 1196, pp 444-454, 2019.
DOI: 10.1016/j.molstruc.2019.06.074
142. Pinto, S. M., Tomé, V. A., Calvete, M. J. F., Castro, M. M. C. A., Tóth, E., Geraldes, C. F. G. C., *Metal-based redox-responsive MRI contrast agents*, *Coord. Chem. Rev.*, 390, pp 1-31, 2019.
DOI: 10.1016/j.ccr.2019.03.014
143. Pinto, S. M. A., Vinagreiro, C. S., Tomé, V. A., Piccirillo, G., Damas, L., Pereira, M. M., *Nitrobenzene method: A keystone in meso-substituted halogenated porphyrin synthesis and applications*, *J. Porphyrins Phthalocyanines*, 23, pp 329-346, 2019.
DOI: 10.1142/S1088424619300039
144. Pinto, S. M. A., Calvete, M. J. F., Ghica, M. E., Soler, S., Gallardo, I., Pallier, A., Laranjo, M. B., Cardoso, A. M. S., Castro, M. M. C. A., Brett, C. M. A., Pereira, M. M., Tóth, E., Geraldes, C. F. G. C., *A biocompatible redox MRI probe based on a Mn(II)/Mn(III) porphyrin*, *Dalton Trans.*, 48, pp 3249-3262, 2019.
DOI: 10.1039/c8dt04775h
145. Rodrigues, F. M. S., Calvete, M. J. F., Monteiro, C. J. P., Carabineiro, S. A. C., Maria, T. M. R., Figueiredo, J. L., Pereira, M. M., *Hydroaminomethylation reaction as powerful tool for preparation of rhodium/phosphine functionalized nanomaterials. Catalytic evaluation in styrene hydroformylation*, *Catal. Today*, em publicação, 2019.
DOI: 10.1016/j.cattod.2019.05.045
146. Schaberle, F. A., Reis, L. A., Serpa, C., Arnaut, L. G., *Photon Momentum Transfer at Water/Air Interfaces under Total Internal Reflection*, *New J. Phys.*, 21, 033013, 2019.
DOI: 10.1088/1367-2630/ab098a
147. Silva, A. D., Serpa, C., Arnaut, L. G., *Photoacoustic Transfection of DNA Encoding GFP*, *Sci. Rep.*, 9, 2553, 2019.
DOI: 10.1038/s41598-018-37759-1
148. Silva, J. F. C., Rosado, M. T. S., Jasiurkowska-Delaporte, M., Ramos Silva, M., Piedade, M. F. M., Dryzek, E., Eusébio, M. E. S., *Ordered and plastic crystals in the complex polymorphism of pinanediol*, *Cryst. Growth Des.*, 19, pp 6127-6135, 2019.
DOI: 10.1021/acs.cgd.9b00428

149. Souza, W. C., Dias, L. D., Queiroz, J. E., Vidal, H. D. A. S., Barreto, V., Leopoldino, A. M., Paula da Silva, C. H. T., Verde, G. M. V., Aquino, G. L. B., *N-acylhydrazones derivatives as novel ligands against cancer in inhibition of interaction between nucleic acids and hnRNP K protein*, *Curr. Bioact. Compd.*, 15, pp 1-10, 2019.

DOI: 10.2174/1573407215666190131121059

150. Zhang, S., Wang, Y., Xie, W., Howe, E. N. W., Busschaert, N., Sauvat, A., Leduc, M., Gomes-da-Silva, L. C., Chen, G., Martins, I., Deng, X., Maiuri, L., Kepp, O., Soussi, T., Gale, P. A., Zamzami, N., Kroemer, G., "Squaramide-based synthetic chloride transporters activate TFEB but block autophagic flux." *Cell Death Dis.* 2019 Mar 11;10(3): 242.

DOI: 10.1038/s41419-019-1474-8

151. Gonzalez, M. Martinez, Varandas, A. J. C., Xavier, F. George D., *Global Potential Energy Surface for HO₂⁺ Using the CHIPR Method*, *J. Phys. Chem. A*, 123, pp 1613-1621, 2019.

DOI: 10.1021/acs.jpca.8b12005

152. Rocha, C. M. R., Li, Jing, Varandas, A. J. C., *Difficulties and Virtues in Assessing the Potential Energy Surfaces of Carbon Clusters via DMBE Theory: Stationary Points of C-kappa (kappa=2-10) at the Focal Point*, *J. Phys. Chem. A*, 123, pp 3121-2130, 2019.

DOI: 10.1021/acs.jpca.8b11632

153. Varandas, A. J. C., *CBS extrapolation of Hartree-Fock energy: Pople and Dunning basis sets hand-to-hand on the endeavour*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 21, pp 8022-8034, 2019.

DOI: 10.1039/c8cp07847e

154. Borges, Y. G., Galvão, B. R. L., Mota, V. C., Varandas, A. J. C., *A trajectory surface hopping study of N-2(A(3)Sigma(+)(u)) quenching by H atoms*, *Chem. Phys. Lett.*, 764, pp 61-64, 2019.

DOI: 10.1016/j.cplett.2019.05.016

155. Alves, M. V., Gonçalves, C. E. M., Braga, J. P., Mota, V. C., Varandas, A. J. C., Galvão, B. R. L., *Quasiclassical Study of the C(P-3) + NO(X-2 Pi) and O(P-3) + CN(X-2 Sigma(+)) Collisional Processes on an Accurate DMBE Potential Energy Surface*, *J. Phys. Chem. A*, 123, pp 7195-7200, 2019.

DOI: 10.1021/acs.jpca.9b03860

156. Rocha, C. M. R., Varandas, A. J. C., *Accurate CHIPR Potential Energy Surface for the Lowest Triplet State of C-3*, *J. Phys. Chem. A*, 123, pp 8154-8169, 2019.

DOI: 10.1021/acs.jpca.9b03194

157. Ghosh, S., Sharma, R., Adhikari, S., Varandas, A. J. C., *Fully coupled (J > 0) time-dependent wave-packet calculations using hyperspherical coordinates for the H + O-2 reaction on the CHIPR potential energy surface*, *Phys. Chem. Chem Phys.*, 21, pp 20166-20176, 2019.

DOI: 10.1039/c9cp03171e

158. Rocha, C. M. R., Varandas, A. J. C., *A global CHIPR potential energy surface for ground-state C₃H and exploratory dynamics studies of reaction C-2 + CH -> C-3 + H*, *Phys. Chem. Chem Phys.*, 21, pp 24406-24418, 2019.

DOI: 10.1039/c9cp04890a

159. Varandas, A. J. C., Pansini, F. N. N., *Optimal diffuse augmented atomic basis sets for extrapolation of the correlation energy*, *Int. J. Quantum Chem.*, article number e26135, 2019.

DOI: 10.1002/qua.26135

160. Rodrigues, S. P. J., *Some notes on the pedagogical value of historical pathological science examples from Chemistry and Physics*, *História da Ciência e Ensino: Construindo Interfaces*, 20, pp. 747-760, 2019.

DOI: 10.23925/178-2911.2019v20espp747-760

161. Gaudêncio, J. S., Ruivo, D. M., Silveira, R. C. F., Rodrigues, S. P. J., *Breve perspectiva historiográfica sobre a ancestralidade da etnia indígena Kaingang*, *Cadernos do CEOM*, 32, pp. 115-128, 2019.

DOI: 10.22562/2019.50.09

ARTIGOS PUBLICADOS EM REVISTAS NACIONAIS COM REVISÃO POR PARES

1. Almeida, Z., Cruz, P., Avelas, F., Ruben, R., Silva, S., Campos, M. J., Vaz, D. C. *Spectroscopic characterization of chitosans of fungal origin: Absidia sp and Cunninghamella sp.* 8º Congresso Nacional de Biomecânica. pp. 121-122. 2019.
ISBN: 978-972-789-586-1
2. Rodrigues, S. P. J., *Descer na Lua com as mãos na Terra*, Jornal de Letras, 28 de Agosto, 2019. (convidado)
3. Rodrigues, S. P. J., *Amazónia, "onde nasce o perigo, cresce também a salvação?"* Jornal de Letras, 12 de Setembro, 2019. (convidado)
4. Rodrigues, S. P. J., *Quatro Centenários que Celebram a Humanidade*, Jornal de Letras, 21 de Dezembro, 2019.
5. Almerinda, R., (entrevista), Rodrigues, S. P. J., *O que lhe diz o número 118?*, Jornal de Economia, 26 de julho, 2019. (convidado, traduzido e capa)

COMUNICAÇÕES APRESENTADAS EM REUNIÕES CIENTÍFICAS

Lições Plenárias, Comunicações e Pósteres Apresentados em Reuniões Científicas Internacionais

1. Sarmento, D., Galvão, A., Seixas de Melo, J., *Excited State Deactivation Mechanisms in Indirubin: Photostability and Interaction (with G-Quadruplex)*, Book of abstracts of the 17th International Congress on Photobiology and 18th Congress of the European Society for Photobiology – World Congress – Light & Life, Physical and Chemical Photobiology Poster abstracts section, P175, Barcelona, Spain, 2019. Poster
2. Martelo, L., Marques, L., Burrows, H., Berberan Santos, M. N., *Low-Cost Device for Detection of Explosives Vapours.*, 3rd International Conference CBRNE - Research & Innovation, Nantes, France, 2019. **Conference paper**
3. Melro, E., Medronho, B., Valente, A. J. M., Antunes, F. E., *Dissolution of kraft lignin in alkaline solutions*, 8th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces, Aveiro, 2019. **Poster.**
4. Martins, G., Baptista, C., Santos, C., Mateus, A., Antunes, F. E., *Thermoplastic Composites composed of hybrid wood and wool fibres incorporated in different polymeric matrices*, European Polymer Congress, Hersonissos, Heraklion, Crete, Greece, 2019. **Poster.**
5. Martins, G., Massano, A., Figueira, C., Rodrigues, C., Antunes, F. E., *Coffee silverskin as fibre reinforcement of thermoplastic composites*, European Polymer Congress, Hersonissos, Heraklion, Crete, Greece, 2019. **Poster.**
6. Valente, A. J. M., *Polyelectrolytes - a wide range of amazing applications*, X Congreso de jóvenes investigadores en polímeros, Burgos, Spain, 2019. **Lição Plenária.**
7. Valente, A. J. M., *Porphyrin-containing SPEEK composite membranes for fuel cells*, Workshop on Energy Storage Solutions, FEUP, Porto, Portugal, 2019. **Comunicação Convidada.**
8. Verissimo, L. M. P., Utzeri, G., Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., *Poly(b-cyclodextrin) based absorbent materials for removing cymoxanil and imidacloprid pesticides.* 15^o Congresso da Sociedade Brasileira de Polímeros (CBPol), Bento Gonçalves, Brasil, 2019. **Keynote Lecture.**
9. Aguado, R., Murinho, D., Valente, A. J. M., *Binding cyclodextrins to a cellulosic matrix by direct etherification*, 8th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces, Aveiro, 2019. **Comunicação Oral.**
10. Vareda, J. P., Valente, A. J. M., Durães, L., *Heavy metal uptake with silica aerogels and xerogels modified with amines*, 8th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces, Aveiro, 2019. **Comunicação Oral.**
11. Penido, J. A., Valente, A. J. M., Moreno, M. J., Mageste, A. B., Ferreira, G. M. D., *How does surfactant act to separate different dyes using an aqueous twophase system?*, 8th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces, Aveiro, 2019. **Comunicação Oral.**

12. Silva, M., Capela-Pires, J., Campos-Gonçalves, I., Bueno, P. V. A., Matsushita, A. F. Y., Rubira, A. F., Muniz, E. C., Durães, L., Murtinho, D. M. B., Filho, C., Valente, A. J. M., Craveiro, A. C., *Biological activity of chitosan/pectin-based hydrogel: green alternative for infected wounds*, 7th International Conference on Biobased and Biodegradable Polymers (BIOPOL 2019), Stockholm, Sweden, 2019. **Poster.**
13. Antonucci, C., D'Errico, G., Valente, A. J. M., *Micellization characterization of aqueous solution of salt-free cationic surfactants*, 8th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces, Aveiro, 2019. **Poster.**
14. Faro, M. T., Matsushita, A. F. Y., Valente, A. J. M., *Polyelectrolyte functionalized frameworks for security applications*, 8th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces, Aveiro, 2019. **Poster.**
15. Ferreira, A. C. S., Carta, A. M. S., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Enhance of water absorption by crosslink cellulose*, 8th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces, Aveiro, 2019. **Poster.**
16. Cobo, A., Bento, D., Cova, T., Nunes, S., Valente, A., Vitorino, C., Pais, A., *PVA-NLC films for transdermal drug delivery*, 8th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces, Aveiro, 2019. **Poster.**
17. 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., *Porphyrin-containing SPEEK composite membranes for fuel cells*, 8th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces, Aveiro, 2019. **Poster.**
18. Utzeri, G., Verissimo, L. M. P., Ribeiro, A. C. F., Murtinho, D., Valente, A. J. M., *Sorption of imidacloprid and cymoxanil onto poly- β -cyclodextrin gels*, 8th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces, Aveiro, 2019. **Poster.**
19. Matsushita, A. F. Y., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M., *Aqueous copper(II) luminescent probes based on Eu(III)-containing coordination gel composites*, 8th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces, Aveiro, 2019. **Poster.**
20. Filova, B., Verissimo, L. M. P., Mracek, A., Musilova, L., Ramos, M. L., Valente, A. J. M., Ribeiro, A. C. F., *Effect of sodium salts on the diffusion of poly(vinyl alcohol) in aqueous solutions*, 8th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces, Aveiro, 2019. **Poster.**
21. Sato, T. P., Borges, A. L. S., Valente, A. J. M., *Chitosan-DNA hydrogels for Propolis delivery*, 15º Congresso da Sociedade Brasileira de Polímeros (CBPol), Bento Gonçalves, Rio Grande do Sul, Brasil, 2019. **Poster.**
22. Matsushita, A. F. Y., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M., *Study of cation and anion interference in the luminescent properties of Eu(PSA)PHEN*, 15º Congresso da Sociedade Brasileira de Polímeros (CBPol), Bento Gonçalves, Rio Grande do Sul, Brasil, 2019. **Poster.**

23. Susano, M., Sobral, A. J. F. N., Roseiro, T., Lavín, V., Martín, I. R., Gil, J. M., Pereira, L. C. J., Silva, M. R., *Magnetic-Metal Organic Frameworks (Magnetic-MOFs): Two Lanthanide Specimens, Photophysics of Molecular Magnets Conference*, Royal Society of Edinburgh, The University of Edimburg, Scotland, UK, 2019. **Poster.**
24. Pedro, S., Laranjo, M., Aguiar, A., Botelho, M. F., Sobral, A. J. F. N., *Photodynamic therapy on a human lung cancer cell line A₅₄₉ with new bodipy photosensitizers*, 5th International Electronic Conference on Medicinal Chemistry, MDPI, 2019. **Electronic Poster.**
25. Santos, L. F. K., Aguiar, A., Sobral, A. J. F. N., *BODIPY (meso-phenyl-meso) dimer as a photovoltaic material*, The 23rd International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry, MDPI, 2019. **Electronic Poster.**
26. Santos, C. I. A. V., Barros, M. C. F., Shevtsova, V., Ribeiro, A. C. F., *Multicomponent Diffusion in Hydrocarbon Mixtures*, XXV Encontro Galego – Português De Química, Colégio Oficial de Químicos da Galicia, Santiago De Compostela, Spain, 2019. **Comunicação Oral**
27. Santos, C. I. A. V., Barros, M. C. F., Shevtsova, V., Ribeiro, A. C. F., *High pressure Taylor dispersion technique as a tool for the measurement of diffusion coefficients in supercritical carbon dioxide*, XXV Encontro Galego – Português de Química, Colégio Oficial de Químicos da Galicia, Santiago De Compostela, Spain, 2019. **Poster**
28. Valente, A. J. M., *Biogel-Pesticide Interactions: a challenging link*, University of Toulon, France, 2019. **Comunicação Oral.**
29. Vitorino, C., Mendes, M., Basso, J., Silva, J., Cova, T. F. G. G., Nunes, S. C. C., Gonçalves, L., Almeida, A., Fortuna, A., Falcão, A., Sousa, J., Pais, A. A. C. C., *Lipid nanoparticles in drug delivery: What have we learned so far?*, 8th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces: RICl 8, Aveiro, Portugal, 2019. **Lição Convidada**
30. Pais, A. A. C. C., *Polyelectrolyte interaction, confinement and adsorption*, XXVI Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Porto, Portugal, 2019. **Keynote**
31. Cova, T. F. G. G., Vitorino, C. S., Nunes, S. C. C., Pais, A. A. C. C., *The many facets of cyclodextrin complexes*, 13th International Meeting of the Portuguese Carbohydrate Group - GLUPOR 13, Porto, Portugal, 2019. **Keynote**
32. Vitorino, C., *Nanotechnology and glioblastoma: What have we learned so far?*, Nanotechnology and brain drug delivery Workshop, Coimbra, Portugal, 2019. **Comunicação oral**
33. Miranda, M., Cardoso, C., Vitorino, C., *aQbD as a Framework for in vitro Release Testing Development*, Nanotechnology and brain drug delivery Workshop, Coimbra, Portugal, 2019. **Comunicação oral**
34. Henriques, J., Cardoso, C., Vitorino, C., *Process analytical technologies and injectable drug products: Is there a future?*, Nanotechnology and brain drug delivery Workshop, Coimbra, Portugal, 2019. **Comunicação oral**

35. Simões, A., Veiga, F., Vitorino, C., *A practical framework for implementing Quality by Design to the development of topical drug products: Nanosystem-based dosage forms*, Nanotechnology and brain drug delivery Workshop, Coimbra, Portugal, 2019. **Comunicação oral**
36. Miranda, M., Cardoso, C., Vitorino, C., *aQbD as a platform for IVRT method development—a regulatory oriented approach*, CRS Annual Meeting & Exposition, Valencia, Espanha, 2019. **Comunicação oral**
37. Mendes, M., Silva J., Basso, Cova, T. F. G. G., Sousa, J., Pais, A. A. C. C., Vitorino, C. S., *Engineered cationic ultra-small lipid nanoparticles for glioblastoma treatment*, Okinawa Colloids 2019, Okinawa, Japan, 2019. **Comunicação oral**
38. Vitorino, C., Silva, S., Bicker, J., Carona, A., Falcão, A., Fortuna, A., *Designing lipid nanoparticles for intranasal delivery of antidepressants*, Drug Delivery to the Lungs 2019, Edinburgh, 2019. **Comunicação oral**
39. Miranda, M., Cardoso, C., Vitorino, C., *aQbD as a Framework for in vitro Release Testing Development*, 1st Annual Meeting in Pharmaceutical Sciences, Faculdade de Farmácia da Universidade de Coimbra, Coimbra, Portugal, 2019. **Comunicação oral**
40. Cova, T. F. G. G., Vitorino, C. S., Nunes, S. C. C., Pais, A. A. C. C., *Computational modeling of drug recognition and free-energy patterns in cyclodextrin-based nanostructures*, Okinawa Colloids 2019, Okinawa, Japan, 2019. **Comunicação Oral**
41. Cova, T. F. G. G., Nunes, S. C. C., Pais, A. A. C. C., *Unveiling the effect of structural flexibility and cavity space filling on the molecular recognition of cyclodextrins by free-energy calculations*, RIC18 – 8th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces, Aveiro, Portugal, 2019. **Comunicação Oral**
42. S. C. C. Nunes, A. A. C. C. Pais., *The role of electrostatic interactions in biological DNA-related systems: Insights from Monte Carlo simulations*, RIC18 – 8th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces, Aveiro, Portugal, 2019. **Comunicação Oral**
43. Nunes, S. C. C., Cova, T. F. G. G., Pais, A. A. C. C., *Monte Carlo Simulations on biological inspired systems: the role of electrostatics*, Okinawa Colloids 2019, Okinawa, Japan, 2019. Book of abstracts of Okinawa Colloids 2019, Soft Matter, Active Matter and Dynamical Self-organization of Biomolecular Systems poster abstracts section, Okinawa, Japan, Novembro 2019. **Poster.**
44. Cobo, A., Bento, D., Cova, T. F. G. G., Nunes, S. C. C., Valente, A., Vitorino, C. S., Pais, A. A. C. C., *PVA-NLC films for transdermal drug delivery*, RIC18 – 8th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces, Aveiro, Portugal, 2019. Book of abstracts of RIC18, poster communications abstracts section, Aveiro, Portugal, 2019. P42, **Poster.**
45. Cova, T. F. G. G., Nunes, S. C. C., Pais, A. A. C. C., *Modeling of drug recognition by cyclodextrin-based nanostructures: a computational approach*, International conference on medical, biological and pharmaceutical sciences, Cape Town, South Africa, 2019. **Poster.**

46. Barone, A., Mendes, M., Cabral, C., Mare, R., Paolino, D., Vitorino, C., *Simvastatin loaded chitosan coated NLC topical films as adjuvant treatment of melanoma skin lesions*, 3rd European Conference on Pharmaceutics, Bologna, Italy, 2019. **Poster**
47. Miranda, M., Pais, A., Cardoso, C., Carla Vitorino, C., *aQbD as a Framework for in vitro Release Testing Development*, Skin & Formulation 5th Symposium & 17th Skin Forum, Reims, France, 2019. **Poster**
48. Simões, A., Veiga, F., Vitorino, C., *Developing Cream Formulations: Renewed Interest in an Old Problem*, Skin & Formulation 5th Symposium & 17th Skin Forum, Reims, France, 2019. **Poster**
49. Sousa, J., Silva, J., Mendes, M., Basso, J., Cova, T., Pais, A., Vitorino, C., *Unstructured formulation data analysis for the optimization of lipid nanoparticle drug delivery vehicles*, IASTEM - 688th International Conference on Medical, Biological and Pharmaceutical Sciences (ICMBPS), Cape Town, South Africa, 2019. **Poster**
50. Gonçalves, J., Silva, S., Vitorino, C., Alves, G., Fortuna, A., *How does the device determine nose-to-brain drug delivery to mice?*, Drug Delivery to the Lungs, Edinburgh, 2019. **Poster**
51. Basso, J., Mendes, M., Silva, J., Sousa, J., Pais, A., Vitorino, C., *Erythrocyte membrane-coated nanoparticles: a biomimetic optimization study by experimental design*, Okinawa Colloids, Okinawa, Japan, 2019. **Poster**
52. Mendes, M., Basso, J., Silva, J., Sousa, J., Grijalvo, S., Eritja, R., Pais, A., Vitorino, C., *Serinol-based nanostructured lipid nanoparticles for glioblastoma treatment*, Okinawa Colloids 2019, Okinawa, Japan, 2019. **Poster**
53. Miranda M., Pais, A., Vitorino, C., *Batch-to-batch variability of semisolid topical drug products*, Okinawa Colloids 2019, Okinawa, Japan, 2019. **Poster**
54. Basso, J., Mendes, M., Silva, J., Sousa, J., Pais, A., Vitorino, C., *Erythrocyte membrane stealth nanoparticles: a Taguchi optimization study*, 1st Annual Meeting in Pharmaceutical Sciences, Coimbra, Portugal, 2019. **Poster**
55. Mendes, M., Basso, J., Silva, J., Sousa, J., Grijalvo, S., Eritja, R., Pais, A., Vitorino, C., *Serinol-based nanostructured lipid nanoparticles for glioblastoma treatment*, 1st Annual Meeting in Pharmaceutical Sciences, Coimbra, Portugal, 2019. **Poster**
56. Henriques, J., Schaberle, F., Serpa, C., Cardoso, C., Vitorino, C., *A new photoacoustic method for salt assay in solution*, 1st Annual Meeting in Pharmaceutical Sciences, Coimbra, Portugal, 2019. **Poster**
57. Miranda, M., Cardoso, C., Vitorino, C., *Batch-to-batch variability of semisolid topical drug products*, 1st Annual Meeting in Pharmaceutical Sciences, Coimbra, Portugal, 2019. **Poster**
58. Simões, A., Veiga, F., Vitorino, C., *Improving cream performance based on a Quality by Design approach*, 1st Annual Meeting in Pharmaceutical Sciences, Coimbra, Portugal, 2019. **Poster**

59. Pereira, F. B., Lourenço, N., Jesus, W. S., Prudente, F. V., Marques, J. M. C., Discovering low-energy atomic clusters with machine learning, *53rd Annual Scientific Meeting of the European Society of Clinical Investigation "The Clocks of Metabolism and Disease"*, Coimbra, Portugal, 2019. **Comunicação Oral.**

60. Marques, J. M. C., *On the most promising polymers to remove pesticides from water: a computational study*, University of Toulon, France, 24th June, 2019. **Comunicação Oral.**

61. Marques, J. M. C., *Microsolvation of ions by using state-of-the-art methods based on artificial intelligence*, XXXVII Biennial Meeting of the Spanish Royal Society of Physics: Frontiers in Molecular Physics Symposium, Zaragoza, Spain, July, 2019. **Invited Oral Communication**

62. Ribeiro, A. C. F., *Diffusion and its Impact on Biological Systems, Recent Advances in this area of transport properties*, Seminário no Departamento de Química da Universidade de Alcalá de Henares, Madrid, Espanha, 2019. **Seminar**

63. Ribeiro, A. C. F., *Transport Phenomena in Aqueous Solutions*, Seminário no Departamento de Química da Faculdade de Ciências da Universidade Nacional da Colômbia, Bogotá, Colômbia, 2019. **Seminar**

64. Ribeiro, A. C. F., *Transport properties of aqueous systems containing drugs, salts, amino acids and carriers. Recent Advances in this area of transport properties*, Seminário no Departamento de Química da Faculdade de Ciências da Universidade Nacional da Colômbia, Bogotá, Colômbia, 2019. **Seminar**

65. Brandão P., Burke, A. J., Pineiro, M., *Synthesis of Oxindole-Peptide Hybrids – Application of the Ugi Reaction in the preparation of New Compounds with Drug-like Properties*, International Symposium on Synthesis and Catalysis, ISySyCat, Évora, Portugal, 2019. **Poster.**

66. Pinho e Melo, T. M. V. D., *The Chemistry of Nitrosoalkenes, Azoalkenes and 1-Azadienes in the Synthesis of Heterocyclic Compounds*, 10th Eurasian Meeting in Heterocyclic Chemistry (EAMHC-2019), Milano Marittima-Cervia, Italy. **Lição Plenária.**

67. Alves, A. J. S., Soares, M. I. L., Lopes, S. M. M., Prudêncio, M., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Synthesis of Novel Chiral Spiro-Lactams from Alkylidene-Lactams*, International Symposium on Synthesis and Catalysis, ISySyCat, Évora, Portugal, 2019. **Poster.**

68. Grosso, C., Alves, C. C., Cardoso, A. L., Burke, A., Lemos, A., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Asymmetric Neber Reaction in the Synthesis of Tetrazolyl-Azirine Assemblies*, International Symposium on Synthesis and Catalysis, ISySyCat, Évora, Portugal, 2019. **Poster.**

69. Afonso, M. B., Marques V., Pereira, D. M., Frizzo, C. P., Marques, M. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Pedrosa, R., Salmain, M., Jaouen, G., Pigeon, P., Ferreira, M. J. U., Moreira, R., Afonso, C. A. M., Rodrigues, C. M. P., *High-throughput phenotypic screening of colon cancer stem cell inhibitors using tumourspheres*, United European Gastroenterology Eeek, Barcelona, Spain, 2019. **Comunicação Oral.**

70. Afonso, M. B., Marques V., Pereira, D. M., Frizzo, C. P., Marques, M. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Pedrosa, R., Salmain, M., Jaouen, G., Pigeon, P., Ferreira, M. J. U., Moreira, R., Afonso, C. A. M., Rodrigues, C. M. P., *Discovery of colon cancer stem cell inhibitors by high-throughput screening in a 3D spheroid model*, 11th International Meeting of the Portuguese Society for Stem Cells and Cell Therapies, Lisboa, 2019. **Poster**
71. Tavares, N. C. T., Costa, D., Murtinho, D., Serra, M. E. S. *Synthesis and catalytic application of thiazolidines in enantioselective reactions with zinc Reagents*, International School of Organometallic Chemistry, Camerino, Italy, 2019. **Poster.**
72. Adão, R., Cruz, P. F., Vaz, D. C., Fonseca, F., Ferreira-da-Silva, F., Brito, R. M. M., Otzen, D., Keller, S., Bastos, M. *DIBMALPs nanodiscs keep alfa-synuclein folding*. Synuclein Meeting 2019: Where we are and where we need to go, Ofir-Porto, Portugal. Setembro 2019. **Poster.**
73. Almeida, Z. L., Jesus, C. S. H., Faria, T. Q., Cruz, P. F., Vaz, D. C., Brito, R. M. M. *Exploring folding and aggregation by human transthyretin (TTR)*. Workshop on Integrative Approaches to Protein Folding & Aggregation. FCUL, Lisboa, Portugal, Junho 2019. **Poster.**
74. Benfeitás, R., Selvaggio, G., Antunes, F., Coelho, P., Salvador, A. *Biochemistry of G6PD, with a focus on human erythrocytes*, G6PD deficiency: what's new? Kuala Lumpur, Malásia, Outubro 2019. **Lição convidada**
75. Cabré, E. J., Martínez-Calle, M., Prieto, M., Fedorov, A., Olmeda, B., Loura, L. M. S., Pérez-Gil, J., *The hydrophobic pulmonary surfactant proteins SP-B and SP-C in interaction with membranes: topology, lipid selectivity and homo and hetero-oligomerization*, Annual Meeting of the Brazilian Society of Biochemistry and Molecular Biology, Águas de Lindóia, Brasil, Maio 2019. **Comunicação Oral.**
76. Castro, M. M. C. A., Campello, M. P. C., Silva, F., Paulo, A., Gano, L., Jurado, A. S., Cardoso, A. M., de Lima, M. C., Geraldés, C. F. G. C., Tóth, É., Pallier, A., Mème, S., Lacerda, S., *Targeted Bimodal Gold Nanoparticles for MRI/SPECT Imaging*, 15th International Symposium on Applied Bioinorganic Chemistry (15th ISABC), Nara, Japão, Junho 2019. **Comunicação Oral.**
77. Coreta-Gomes, F., Lopes, G. R., Passos, C. P., Geraldés, C. F. G. C., Moreno, M. J., Nyström, L., Coimbra, M. A., *In vitro hypocholesterolemic effect of coffee compounds*, Cocotea 2019, Bremen, Alemanha, June 2019. **Poster.**
78. Cunha, A. E. S., Simões, C. J. V., Brito, R. M. M., *Design of na In Silico workflow to discover new Influenza A NS1 inhibitors and Experimental Validation Using NMR*. 4th Instruct Biennial Structural Biology Conference, Alcalá de Henares, Madrid, Espanha, Maio 2019. **Poster.**
79. Cunha, A. E. S., Cruz, P. F., Almeida, Z. C., Castanheira, P., Simões, C. J. V., Brito, R. M. M., *Towards the discovery of Influenza NS1 Inhibitors: a combined in silico and NMR fragment-based approach*. Small Molecule NMR Conference (SMASH), Sheraton Hotel, Porto, Portugal, Setembro 2019. **Poster.**

80. Geraldes, C. F. G. C., *MRI and CEST: from PARACEST to DIACEST*, Standing at the crossroads: 40 years of MR contrast agents - 16th Meeting of the European Magnetic Resonance Forum (EMRF), Mons, Bélgica, Maio 2019. **Lição convidada.**
81. Geraldes, C. F. G. C., Pinto, S. M. A., Calvete, M. J. F., Ghica, M. E., Brett, C. M. A., Pereira, M. M., Castro, M. M. C. A., Tóth, É., *A Biocompatible Redox MRI Probe Based on a Mn(II)/Mn(III) Porphyrin*, 15th International Symposium on Applied Bioinorganic Chemistry (15th ISABC), Nara, Japão, Junho 2019. **Comunicação Oral.**
82. Geraldes, C. F. G. C., Pinto, S. M. A., Calvete, M. J. F., Ghica, M. E., Brett, C. M. A., Pereira, M. M., Castro, M. M. C. A., Tóth, É., *A Biocompatible Redox MRI Probe Based on a Mn(II)/Mn(III) Porphyrin*, 8^{eme} International Conference of the Institute of Metals in Biology of Grenoble: Metal Complexes in Imaging and Detection, Grenoble, França, Setembro 2019. **Comunicação Oral.**
83. Filipe, H. A. L., Javanainen, M., Salvador, A., Galvão, A. M., Vattulainen, I., Loura, L. M. S. Moreno, M. J., *Quantitative assessment of methods used to obtain rate constants from molecular dynamics simulations*, 16th International Conference in Molecular Systems Biology, Manila, Filipinas, Outubro 2019. **Poster.**
84. Meotti, F. C., Souza, L. F., Susana, M., Peskin, A., Winterbourn, C. C., Salvador, A., *Detailed analysis of Prdx2's Trp fluorescence recovery after H2O2 treatment reveals unexpected complexity of resolution kinetics*, International SPP1710 conference - Thiol-based switches and redox regulation – from microbes to men, Sant Feliu de Guixols, Espanha, Setembro 2019. **Comunicação oral.**
85. Miranda-Santos, I., Heinzle, E., Salvador, A., *Assessing metabolic fluxes at S phase of the cell cycle through 13C-tracing of DNA deoxynucleosides*, 16th International Conference in Molecular Systems Biology, Manila, Filipinas, Outubro 2019. **Lição convidada.**
86. Miranda-Santos, I., Heinzle, E., Salvador, A., *Modelling the metabolic heterogeneity over the cell division cycle towards metabolic flux rate quantification – A 13C-MFA approach*, 53rd Annual Scientific Meeting of the European Society for Clinical Investigation, Coimbra, Portugal, Maio 2019. **Comunicação oral.**
87. Miranda-Santos, I., Heinzle, E., Salvador, A., *Assessing the metabolism at S-phase through 13C-tracing of DNA deoxynucleosides*, FEBS advanced course in Oncometabolism, Luso, Portugal, Setembro 2019. **Comunicação oral.**
88. Rosário-Ferreira, N., Melo, R., Barreto, C., Moreira, I. S., Brito, R. M. M., *A Molecular Dynamics Insight to Non-Structural Protein 1 (NS1) – A Hub Protein Essential for Influenza Infection*. 4th Instruct Biennial Structural Biology Conference, Alcalá de Henares, Madrid, Espanha, Maio 2019. **Poster.**
89. Rosário-Ferreira, N., Melo, R., Barreto, C., Moreira, I. S., Brito, R. M. M., *Understanding the role of the non-structural protein 1 in the pathogenicity of influenza virus using a computational approach*. Structural Bioinformatics Course, Cambridge, Reino Unido. Setembro 2019. **Poster.**

90. Rosário-Ferreira, N., Melo, R., Barreto, C., Moreira, I. S., Brito, R. M. M., *An integrative approach to understand protein plasticity – The case of non-structural protein 1 from the influenza virus*. PTNMR Satellite Meeting, Porto, Portugal, Setembro 2019. **Poster.**
91. Rosário-Ferreira, N., Melo, R., Barreto, C., Moreira, I. S., Brito, R. M. M., *A molecular Dynamics study of non-structural protein1 (NS1)*. Advances in Computational Biology Conference – Fostering Collaboration Among Women Scientists, Barcelona, Espanha, Novembro 2019. DOI: 10.7490/f1000research.1117796.1. **Poster.**
92. Rosário-Ferreira, N., Melo, R., Barreto, C., Moreira, I. S., Brito, R. M. M., *A molecular Dynamics study of non-structural protein1 (NS1)*. Encontro de Jovens Investigadores de Biologia Computacional Estrutural, Lisboa, Portugal, Dezembro 2019. **Poster.**
93. Salvador, A., *Computational modeling of kinetics: from molecules to biochemical pathways*, G6PD deficiency: what's new?, Kuala Lumpur, Malásia, Outubro 2019. **Lição convidada.**
94. Travasso, R. D. M., Sampaio dos Aidos, F., Bayani, A., Abranches, P., Salvador, A., *H₂O₂ signaling in the cytoplasm of eukaryotic cells: what mechanisms are viable?* Workshop on Mechanobiology in Migrating Cells, Coimbra, Portugal, Março 2019. **Lição convidada.**
95. Reva, I., Nunes, C. M., Fausto, R., Lopes Jesus, A. J., *Control of Molecular Conformation with Near-Infrared Laser Light*, Humboldt Colloquium "Research without Borders - Alexander von Humboldt's Legacy Today", Madrid, Spain, 11-13 April 2019. **Comunicação Oral.**
96. Fausto, R., Reva, I., Góbi, S., Nunes, C. M., *IR-Induced Chemistry: From Conformational Changes to Bond-Breaking Processes*, 691st WE-Heraeus-Seminar on Physical Organic Chemistry: Recent Developments in Instrumentation, Structure, Theory, and Mechanisms. Bad Honnef, Germany, 18-21 February 2019. **Lição Plenária Convidada.**
97. Ildiz, G. O., Tarczay, G., Bazsó, G., Apóstolo, R., Fausto, R., *Large-Scale Matrix-Site Changing Mediated by Conformational Conversion*, 691st WE-Heraeus-Seminar on Physical Organic Chemistry: Recent Developments in Instrumentation, Structure, Theory, and Mechanisms, Bad Honnef, Germany, 18-21 February 2019. **Poster.**
98. Fausto, R., *IR-Induced Chemistry: From Conformational Changes to Bond-Breaking Processes and Identification of Rare Chemical Species*, Analyticon 2019 - Analytical and Bioanalytical Methods Conference, San Francisco, USA, 29 April-1 May 2019. **Lição Plenária Convidada.**
99. Ildiz, G.O., Celik, O., Atak, C., Yilmaz, A., Kabuk, H. N., Kaygisiz, E., Ayan, A., Meriç, S., Fausto, R., *Composition Analysis of Soybean Salt-Resistant Mutants by Raman Spectroscopy and Chemometrics*, Analyticon 2019 - Analytical and Bioanalytical Methods Conference, San Francisco, USA, 29 April-1 May 2019. **Poster.**
100. Nogueira, B. A., Cardoso, R., Paixão, J. A., Castiglioni, C., Fausto, R., *Colour Polymorphism: A Computational, Spectroscopic and Structural Study of a Newly Synthesized Compound*, 10th International Congress on Advanced Vibrational Spectroscopy, Auckland, New Zealand, 8-12 July 2019. **Poster.**

101. Fausto, R., *IR-Induced Chemistry: From Conformational Changes to Bond-Breaking Processes and Energetic Crystals*, International Congress on Advanced Materials Sciences and Engineering 2019 (AMSE 2019), Osaka, Japan, 22-24 July 2019. **Comunicação Oral Convidada.**
102. Ildiz, G. O., Fausto, R., *Photoinduced UV Degradation of Matrix-Isolated 3-Chlorobenzaldehyde*, ISER-635th International Conference on Chemical and Environmental Science (ICCES), Phuket, Thailand, 6-7 August 2019. **Poster.**
103. Fausto, R., *Infrared-Induced Chemistry: From Changes in Molecular Shape to Chemical Reactions and Unusual Crystals*, EastWest Chemistry Congress, Palermo, Italy, 13-15 November 2019. **Lição Plenária Convidada.**
104. Fausto, R., *Strategies for Identifying Samples Through Spectroscopy and Chemometrics: A Case Study Focusing on Body Fluids*, International Conference on Molecular Spectroscopy and Biological Applications, Istanbul, Turkey, 17-18 June 2019. **Lição Plenária Convidada.**
105. Fausto, R., *IR-Induced Chemistry: From Conformational Changes to Bond-Breaking/Bond-forming Reactions*, XV International Conference on Molecular Spectroscopy, Wroclaw, Poland, 15-19 September 2019. **Lição Plenária Convidada.**
106. Ildiz, G. O., Fausto, R., *UV-Induced Transformations of 3-Chloro-4-Methoxy-Benzaldehyde in Low Temperature Matrices*, XV International Conference on Molecular Spectroscopy, Wroclaw, Poland, 15-19 September 2019. **Poster.**
107. Ildiz, G. O., Fausto, R., *Conformational Analysis and Photochemistry of 2-Chloro-6-fluorobenzoic Acid Monomers in Solid Xenon*, EastWest Chemistry Congress, Palermo, Italy, 13-15 November 2019. **Poster.**
108. Ildiz, G. O., Bayari, S., Aksoy, U. M., Yorguner, N., Büber, A., Bulut, H., Yılmaz, S. S., Kabuk, H. N., Yavuz, G., Halimoğlu, G., Karadag, A., Kaygisiz, E., Fausto, R., *Vibrational Spectroscopy as a Tool to Diagnose Psychiatric and Neurodevelopmental Disorders, Through Chemometrics Analysis of Spectral Data of Blood Plasma Samples*, EastWest Chemistry Congress, Palermo, Italy, 13-15 November 2019. **Poster.**
109. Nunes, C. M., *Heavy-Atom Tunneling Reaction On The Slippery Potential Energy Surface of Arynitrenes*, XIXth International Workshop on Quantum Atomic and Molecular Tunneling Systems, Borovets, Bulgaria, 17-21 June 2019. **Lição Plenária Convidada.**
110. Ildiz, G. O., *A Multi-Technique Approach to the Study of Hydantoins: from Isolated Molecules to Polymorphs*, International Congress on Advanced Materials Sciences and Engineering 2019 (AMSE 2019), Osaka, Japan, 22-24 July 2019. **Comunicação Oral Convidada.**
111. Yavuz, G., Ildiz, G. O., *Vibrational Spectroscopy and Chemometrics in the Diagnosis of Schizophrenia (SZ) and Bipolar Disorder (BP)*, International Conference on Molecular Spectroscopy and Biological Applications, Istanbul, Turkey, 17-18 June 2019. **Comunicação Oral.**

112. Kabuk, H. N., Ildiz, G. O., *Raman Spectroscopic and Chemometric Study on Yellow Dent and Purple Flint Maize Kernel*, International Conference on Molecular Spectroscopy and Biological Applications, Istanbul, Turkey, 17-18 June 2019. **Comunicação Oral.**
113. Halimoglu, G., Ildiz, G. O., *Attention Deficit/Hiperactivity Disorder in Adults: a Biomarker Study*, International Conference on Molecular Spectroscopy and Biological Applications, Istanbul, Turkey, 17-18 June 2019. **Comunicação Oral.**
114. Karadag, A., Kaygisiz, E., Aysal, N., Öngen, A. S., Ildiz, G. O., *X-ray Powder Diffraction (XRD) Study of a Fulgurite*, International Conference on Molecular Spectroscopy and Biological Applications, Istanbul, Turkey, 17-18 June 2019. **Comunicação Oral.**
115. Fausto, R., *Matrix-Isolation and IR-Induced Chemistry*, VIIth Turkish Inorganic Chemistry Congress, Çorum, Turkey, 19-22 June 2019. **Lição Plenária Convidada.**
116. Ildiz, G. O., Fausto, R., *Photochemistry vs. UV-Induced Conformational Isomerization of 3-Chloro-4-methoxy-benzaldehyde in Cryogenic Inert Matrices*, VIIth Turkish Inorganic Chemistry Congress, Çorum, Turkey, 19-22 June 2019. **Poster.**
117. Baptista, J. A., Castro, R. A. E., Rosado, M. T. S., Maria, T. M. R., Ramos Silva, M., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., *On the investigation of co-crystals of 2,4-diaminopyrimidine based dihydrofolate reductase inhibitors*, 14th Mediterranean Conference on Calorimetry and Thermal Analysis, Roma, 2019. **Comunicação Oral.**
118. Baptista, J. A., Castro, R. A. E., Maria, T. M. R., Ramos Silva, M., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., *Polymorphism of cocrystals: A case study*, XXV Encontro Galego-Portugues de Química, Santiago de Compostela, 2019. **Comunicação Oral.**
119. Silva, J. F. C., Rosado, M. T. S., Eusébio, M. E. S., *Investigation of orientational disorder in solid phases*, XXV Encontro Galego-Portugues de Química, Santiago de Compostela, 2019. **Comunicação Oral.**
120. Maria, T. M. R., Silva, P. N. S. L., Castro, R. A. E., Silva, M. R., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., *Novel solid forms of a recent anti-rheumatic drug: solid state characterization and intrinsic dissolution rate evaluation*, 5th Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry / 14th Mediterranean Conference on Calorimetry and Thermal Analysis, Roma, 2019. **Poster**
121. Maria, T. M. R., Santos, J. P., Castro, R. A. E., Silva, M. R., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., *Molecular structure and plastic crystal formation ability of 1,2-dichlorocyclohexane isomers*, 5th Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry / 14th Mediterranean Conference on Calorimetry and Thermal Analysis, Roma, 2019. **Poster**
122. Ciciliati, M. A., Eusébio, M. E. S., Castro, R. A. E., Cavalheiro, E. T. G., *On the polymorphism of metoprolol free base*, 2nd Journal of Thermal Analysis and Calorimetry Conference (2nd JTACC+V4 2019), Budapeste, 2019. **Poster**

123. Holanda, B. B. C., Bannach, G., Ramos Silva, M., Eusébio, M. E. S., Castro, R. A. E., *Improvement of physical-chemical properties of gemfibrozil*, XXV Encontro Galego-Portugues de Química, Santiago de Compostela, 2019. **Poster**
124. Baptista, J. A., Évora, A. O. L., Rosado, M. T. S., Maria, T. M. R., Castro, R. A. E., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., *Di-hydrofolate reductase inhibitors: can 2,4-diaminopyrimidine be a model for co-crystal screening?* The 44th Conference on Phase Equilibria, Agadir, 2019. **Poster**
125. Silva, P. N. S. L., Maria, T. M. R., Santos, J. R. C., Castro, R. A. E., Silva, M. R., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., *Investigation on solid forms of iguratimod: co-crystals and polymorphs*, The 44th Conference on Phase Equilibria, Agadir, 2019. **Poster**
126. Susano, M., Sobral, A. J. F. N., Maria, T. M. R., Lavín, V., Martín, I. R., Gil, J. M., Pereira, L. C. J., Silva, M. R., *Magnetic-Metal Organic Frameworks (Magnetic-MOFs): Two Lanthanide Specimens*, Photophysics of Molecular Magnets Conference, Edinburgh, 2019. **Poster**
127. Susano, M., Szczytko, J. S., Rybusiński, J., Lavin, P. B., Juszynska-Galazka, E., Maria, T. M. R., Pereira, L. C. J., Silva, M. R., *Magnetic and Luminescent Globular Lanthanide Complexes: the Ln(F20TPIP)₃ Series*, 13th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Magnets, Tomar, 2019. **Poster**
128. Arnaut, L. G., *“Topical treatment of Skin Diseases with Potent Photosensitizers”*, IPA World Congress, 28 de Junho a 4 de Julho de 2019, Boston, USA. **Lição Convidada.**
129. Gomes-da-Silva, L. C., Arnaut L. G., Kepp, O., Kroemer, G., *“Redaporfin targets the endoplasmatic reticulum and the golgi apparatus and is an inducer of immunogenic cell death.”* 17th International Photodynamic Association (IPA) World Congress, Boston, USA. (28th June–4th July, 2019). **Lição convidada.**
130. Donohoe, C., Scharbele, F., Gonçalves, N., Pereira, M. M., Gomes-da-Silva, L. C., Arnaut, L. G., *“Investigation of the implications of atropisomersim for redaporfin-photodynamic therapy efficacy.”* 17th International Photodynamic Association (IPA) World Congress, Boston, USA. (28th June–4th July, 2019). **Comunicação Oral.**
131. Lobo, A. C., Gomes-da-Silva, L. C., Arnaut, L. G., *“Combinatorial approaches with vascular photodynamic therapy with redaporfin and immune checkpoint blockers.”* 17th International Photodynamic Association (IPA) World Congress, Boston, USA. (28th June–4th July, 2019). **Comunicação Oral.**
132. Soares, H. T., Costa, G. N., Monteiro, C. J. P., Abreu, A. R., Rocha, L. B., Schaberle, F. A., Pereira, M. M., Simões, S., Arnaut L. G., *“Can low molecular weight stable bacteriochlorins change the paradigm of topical photodynamic therapy?”*. 17th International Photodynamic Association (IPA) World Congress, Boston, USA. (28th June–4th July, 2019). **Poster**
133. Mendes, M. I. P., Soares, H. T., Lobo, A. C. S., Arnaut, L. G., *“Can glycolysis inhibitors potentiate photodynamic therapy?”*. 17th International Photodynamic Association (IPA) World Congress, Boston, USA. (28th June–4th July, 2019). **Poster**

134. Arnaut, L. G., “*High-intensity, high-frequency photoacoustic waves in gene transfection*”, 20th International Conference on Photoacoustic and Photothermal Phenomena, 7-12 de Julho de 2019, Moscovo, Russia. **Comunicação Oral.**

135. Gomes-da-Silva L. C., “*Biodistribution and Pharmacokinetics*” Photodynamic Therapy Intersectorial Summer School organized by the Innovative Training Network Polythea, Limoge, France. (15th July, 2019). **Lição convidada.**

136. Arnaut, L. G., Pinho e Melo, T. M. V. D., Schaberle, F. A., Cardoso, A. L., *A wider view of free-energy relationships of electron transfer reactions in rigid donor-bridge-acceptor systems*. Gordon Research Conference in Photochemistry, 14-19 de Julho de 2019, Easton (MA, EUA). **Póster.**

137. Gierlich, P., Gomes-da-Silva, L. C., Senge M. O., “*Covalently cross-linked tetrafunctionalized m-THPC chitosan hydrogels as delivery platforms.*” *World Congress on Light and Life (17th Congress of the International Union of Photobiology and 18th Congress of the European Society for Photobiology)*, Barcelona, Spain. (25th-30th August, 2019). **Póster.**

138. Harry C. Sample, Zoi Melissari, Lígia C. Gomes-da-Silva, Mathias O. Senge. “*Bioconjugatable, Long Wavelength Absorbing gem-Dimethyl Chlorins: The Continual Search for Superior Photosensitizers.*” *World Congress on Light and Life (17th Congress of the International Union of Photobiology and 18th Congress of the European Society for Photobiology)*, Barcelona, Spain. (25th - 30th August, 2019). **Póster.**

139. Soares, H. T., Simões S., Arnaut L. G., “*Carboxamide bacteriochlorins as novel preformed photosensitizers for topical PDT of skin disorders*”. 17th Congress of the International Union of Photobiology and 18th Congress of the European Society, Barcelona, Spain. (25th- 30th August, 2019). **Comunicação Oral.**

140. Arnaut L. G., “*Lasers, materials and beauty – how photoacoustic waves can make us look better*”, Joint JRA Meeting and LaserLab Europe Conference, 9-11 de Outubro de 2019, Florença, Itália. **Lição Convidada.**

141. Arnaut L. G., “*Photodynamic Therapy: a contribution to sustainable, high-quality healthcare systems*” Laser Research Centre University of Johannesburg, 1 de Novembro de 2019, Joanesburgo, África do Sul. **Lição Plenária.**

142. Mendes, M. I. P., Schaberle, F. A., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., Arnaut L. G., “*Phthalocyanine loaded nanodroplets for Photoacoustic Tomography*”. XXV Encontro Galego-Portugues de Química, Santiago de Compostela, Espanha. (20-22 Novembro 2019). **Comunicação Oral.**

143. Lobo, A. C. S., Scharberle, F. A., Tomé, V. A., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., Serpa, C., Arnaut, L. G., “*Biocompatible Indium phthalocyanine with near-infrared absorption as contrast agent for photoacoustic imaging*” XXV Encontro Galego-Portugues de Química, Santiago de Compostela, Espanha. (20-22 Novembro 2019). **Comunicação Oral.**



144. Rodrigues, S. P. J., *Some reflections on the (apparent) decline of the use of the history of chemistry in textbooks and teaching in Portugal and other countries*, The 12th International Conference on the History of Chemistry – ICHC2019, Maastricht, The Netherlands, 2019. **Comunicação Oral.**

145. Rodrigues, S. P. J., *Some notes on the pedagogical value of historical pathological science examples from Chemistry and Physics*, The 1st International Congress on the History of Science in Education, UTAD, Vila Real, Portugal, 2019. **Comunicação Oral.**

Lições Plenárias, Comunicações e Pósteres Apresentados em Reuniões Científicas Nacionais

1. Seixas de Melo, J. S., *Como ser um Investigador em Ciência. Génese, Competências e Oportunidades*, IV Encontro Científico do NEQ/AC, Coimbra, 2019. **Lição convidada.**
2. Seixas de Melo, J. S., *As Moléculas da Cor. A Construção das Moléculas a Partir dos Átomos: Três Exemplos Emblemáticos da Química*, Plano Nacional de Leitura (PNL), Museu da Ciência da Universidade de Coimbra, Coimbra, 2019. **Lição convidada.**
3. Seixas de Melo, J. S., *As moléculas da cor: "A Organização dos Átomos em Moléculas que Revolucionaram o Mundo"*, Encontro de Ensino e Divulgação da Química, Escola Brotero, Coimbra, 2019. **Lição convidada**
4. Esteves, C., Orteja-Ojeda, F., Montalvo, G., Antunes, F., *Analysis and discrimination of magic mushrooms by ATR-IR and chemometrics*, XXVI Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Porto, 2019. **Poster**
5. Louro, H. F., *Effect of protein (in)flexibility on the calculation of ligand binding free energy profiles using coarse-grained force fields*, Workshop on Biological Chemistry (WBC) 2019 - Lipids & Proteins - Interactions for Life, Casa Aido Santo, Nespereira, Portugal, 2019. **Comunicação Oral**
6. Jesus, C., Murtinho, D., Antunes, F., *Desenvolvimento de Novos Surfactantes Derivados de Açúcares para a Aplicação Industrial*, 4º Encontro Científico do Núcleo de Estudantes de Química, Coimbra, 2019. **Poster**
7. Jesus, C., Murtinho, D., Antunes, F., *Development of new Glucose-based Surfactants for Industrial Application*, 28º Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Porto, 2019. **Poster**
8. Jesus, C., Murtinho, D., Antunes, F., *Desenvolvimento de Novos Surfactantes Derivados de Açúcares para a Aplicação Industrial*, 7º Encontro Nacional de Estudantes de Química, Lisboa, 2019. **Comunicação Oral**
9. Pedro, S., Laranjo, M., Aguiar, A., Botelho, M. F., Sobral, A. J. F. N., *Design and Synthesis of New BODIPYs for Photodynamic Therapy on a Human Lung Cancer Cell Line*, XIV Annual Cics-Ubi Symposium 2019, Covilhã, Portugal, 2019. **Poster.**
10. Santos, L. F. K., Aguiar, A., Sobral, A. J. F. N., *BODIPY (meso-phenyl-meso) dimer as photovoltaic material*, XXVI Encontro Nacional da SPQ, Porto, Portugal, 2019. **Poster.**
11. Pedro, S., Laranjo, M., Aguiar, A., Botelho, M. F., Sobral, A. J. F. N., *New BODIPYs for Photodynamic Therapy on Adenocarcinomic Human Cancer Cells A549*, XXVI Encontro Nacional da SPQ, Porto, Portugal, 2019. **Poster.**

12. Araújo, J., Pereira, L. C. J., Sobral, A. J. F. N., *Advanced Biomaterials Based in Metal Organic Frameworks (MOFs) for Photodiagnostic, Drug Delivery and Magnetic Hyperthermia Therapy*, Workshop 2019 ChemMat, Centro de Tecnologia Nuclear do IST, Lisboa, Portugal, 2019. **Poster.**
13. Valente, A. J. M., *Aplicação de biogéis para a remoção de poluentes*, BEST Green Days. Departamento de Engenharia Química, Universidade de Coimbra, 2019. **Comunicação Oral.**
14. Marques, J. M. C., *Microsolvation by using computational methods based on artificial intelligence*, Computer Modeling and Simulation Day (CMS 2019), Universidade de Aveiro, Portugal, 2019. **Comunicação Oral.**
15. Marques, J. M. C., *Application of evolutionary algorithms to aid in the design of materials*, XXVI Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Porto, Portugal, 2019. **Poster**
16. Abreu, P. E., *Actividades práticas e demonstrações envolvendo a química dos alimentos: Da cozinha para o laboratório: experiências com e sobre comida!*, Encontro de Ensino e Divulgação da Química 2019, Coimbra, 15 e 16 de Novembro de 2019. **Workshop**
17. Alves, N. G., Simões, C., Bártolo, I., Taveira, N., Brito, R. R., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Understanding the mechanism of action of a new spiro- β -lactam with dual anti-HIV and anti-Plasmodium activity using in silico target fishing*, XXVI Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Porto, 2019. **Comunicação Oral.**
18. Alves, C., Cardoso, A. L., Barrulas, P., Burke, A. J., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Síntese de 2-(tetrazol-5-yl)-2H-azirinas quirais via reacção de Neber assimétrica*, IV Encontro Científico do NEQ/AAC, Coimbra, 2019. **Comunicação Oral.**
19. Santos, J. R. C., Lopes, S. M. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Synthesis and Reactivity of Steroidal 1-Azadienes towards Carbonyl Compounds under Enamine Catalysis*, XXVI Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Porto, 2019. **Poster.**
20. Ramos, H., Soares, J., Raimundo, L., Pinheiro, R., Soares, M. I., Gomes, C., Reis, F., Alberto Inga, A., Pinho e Melo, T. M. V. D., Saraiva, L., *MANIO: A New Potential Anticancer Drug Candidate by Targeting P53*, XLIX Reunião da Sociedade Portuguesa de Farmacologia / XXXVII Reunião de Farmacologia Clínica and XVIII Reunião de Toxicologia, Porto, 2019. **Comunicação Oral.**
21. Ramos, H., Raimundo, L., Soares, M. I., Gomes, C., Reis, F., Chlapek, P., Veselska, R., Inga, A., Pinho e Melo, T. M. V. D., Saraiva, L., *Descoberta de um novo ativador da p53: promissor agente anticancerígeno no tratamento do cancro colo-rectal*, 1º Encontro Nacional de Jovens Investigadores em Oncologia, Porto, 2019. **Poster**
22. Pineiro, M., *Química Orgânica Sustentável – S.O.S*, IV Encontro Científico NEQ/AAC, Coimbra, 2019. **Lição plenária**
23. Pineiro, M., *Sustainable Synthesis of N-heterocycles*, CQE Days Spring Meeting 2019, Lisboa, 2019. **Comunicação Oral Convidada.**

24. Pineiro, M., *Química Verde e Química Sustentável*, Palestra integrada na Universidade de Verão, Coimbra, 2019. **Comunicação Oral.**
25. Pineiro, M., *Sustainable Synthesis of Tetrapyrrolic Macrocycles*, XXVI Encontro Nacional da SPQ, Porto, 2019, **Comunicação Oral Convidada.** (Keynote)
26. Pineiro, M., *Química Verde, Novas Estratégias em Química Orgânica*, Encontro do Ensino e Divulgação da Química, Coimbra, 2019. **Comunicação Oral Convidada.**
27. Gomes, C., Peixoto, M., Pineiro, M., *Síntese Sustentável de Complexos Metálicos de Porfirinas*, IV Encontro Científico NEQ/AAC, Coimbra, 2019. **Comunicação Oral.**
28. Peixoto, M., Gomes, C., Pineiro, M., *Síntese de hidroporfirinas sob ação mecânica*, IV Encontro Científico NEQ/AAC, Coimbra, 2019. **Poster.**
29. Abranches, P., Bayani, A., Coelho, P., Sampaio dos Aidos, F., Selvaggio, G., Travasso, R.D.M., Salvador, A., *Gaining insight on redox signaling through mathematical modeling*, Instituto de Tecnologia Química e Biológica, Oeiras, Outubro 2019. **Lição convidada.**
30. Almeida, Z. L., *AT50 Series: 2-thioxothiazolin-4-one derivatives as novel potent transthyretin stabilizers*. Workshop: Estratégias de Descoberta de Fármacos. 29 Janeiro, Departamento de Química, Universidade de Coimbra, Coimbra, 2019. **Comunicação Oral.**
31. Almeida, Z., Cruz, P., Avelas, F., Ruben, R., Silva, S., Campos, M. J., Vaz, D. C., *Spectroscopic characterization of chitosans of fungal origin: Absidia sp and Cunninghamella sp*. 8º Congresso Nacional de Biomecânica. 15-16 fevereiro. Unhais da Serra, Covilhã, Portugal. 2019. **Poster.**
32. Bertotti, T. R., Branco, A. C. L., Campos, M. J. G., Ribeiro, V., Vaz, D. C., Luís, S. L., *Desenvolvimento de Cerveja tipo Ale com a incorporação de duas frutas nativas portuguesas: Camarinha (Corema album ssp. album) e Myrtus spp.* 5.º Simpósio de Produção e transformação de alimentos em Ambiente Sustentável. PTAAS 07 junho 2019. Escola Superior Agrária, IPBeja. Beja. 2019. **Poster.**
33. Branco, A. C. L., Bertotti, T. R., Campos, M. J. G., Ribeiro, V., Vaz, D. C., Rodrigues, A. C., *Enchimento de chouriços com a incorporação do conservante natural (Myrtus spp.)*. X Conferência de Inovação e Segurança Alimentar - CISA 2019. Escola Superior de Turismo e Tecnologia do Mar, IPLeiria, Peniche. 2019. **Poster.**
34. Geraldes, C. F. G. C., *Contrast agents for Molecular Imaging - the input of Chemistry*, Chemistry: Shaping the Future: 4th Meeting of the CQUL (4ECQUL), Lisboa, Julho 2019. **Lição Convidada.**
35. Moreno, M. J., "Biomembranes – Structure and Function. With a little help from fluorescence", Course of Pharmaceutical Biophysics, Medicines and Pharmaceutical Innovation (i3DU), Jan 2019, Lisboa, Portugal. **Comunicação**

36. Roque, J. P. L., Reva, I., Rosado, M. T. S., Fausto, R., *Matrix-isolated 5-Methoxy-benzimidazole: Control over Multiple Conformational Equilibria*. XXVI Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Porto, Portugal, 24-26 July 2019. **Poster.**
37. Reva, I., Nunes, C. M., Lopes Jesus, A. J., Fausto, R., *Control of Molecular Conformation with Near-Infrared Laser Light*. XXVI Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Porto, Portugal, 24-26 July, 2019. **Poster.**
38. Roque, J. P. L., Reva, I., Rosado, M. T. S., Fausto, R., *Tautomerismo Fotoinduzido em Compostos Heteroaromáticos: Produção e Caracterização de Espécies Raras*. IV Encontro Científico de NEQ/AAC "Química verde: um repensar da química", Coimbra, Portugal, 20-21 February 2019. **Comunicação Oral.**
39. Tabanez, A. M., Nogueira, B. A., Paixão, J. A., Fausto, R., *The Thiabendazole-Formic Acid Solvate: A Crystallographic, Spectroscopic and Thermal Study*, I National Crystallography Meeting, Aveiro, Portugal, 13-14 June 2019. **Poster.**
40. Amado, P. S. M., Brás, E. M., Paixão, J. A., Fausto, R., Cristiano, M. L. S., *Unraveling the Crystal Structure of a Trioxolane and a Tetraoxane with Antiparasitic Activity*, I National Crystallography Meeting, Aveiro, Portugal, 13-14 June 2019. **Poster.**
41. Cardoso, R., Nogueira, B. A., Paixão, J. A., Fausto, R., *Design, Synthesis and Characterization of Novel Thermochromic Materials*, I National Crystallography Meeting, Aveiro, Portugal, 13-14 June 2019. **Poster.**
42. Cardoso, R., Nogueira, B. A., Paixão, J. A., Fausto, R., *Polymorph Screening and Characterization of New Crystallographic Structures of Hydantoin Derivatives*, I National Crystallography Meeting, Aveiro, Portugal, 13-14 June 2019. **Comunicação Oral Convidada.**
43. Fausto, R., *IR-Induced Chemistry: From Conformational Changes to Bond-Breaking/Bond-forming Reactions*, LaserLab-Europe User Meeting, Coimbra, Portugal, 27-19 October 2019. **Lição Plenária Convidada.**
44. Carrilho, R. M. B., *Catalytic CO₂ Conversion for Sustainable Synthesis of Organic Chemicals*, Sunstorage Workshop - Departamento de Química, Universidade Nova de Lisboa, Costa de Caparica, 2019. **Comunicação Oral.**
45. Piccirillo, G., Calvete, M. J. F., Vinagreiro, C. S., Aroso, R. T., Pereira, M. M., *Dealing with the (ab)use of antibiotics: hybrid materials for heterogeneous catalytic downstream treatment*, Ciência 2019 - Science and Technology in Portugal Summit, Lisboa, 2019. **Comunicação Oral.**
46. Piccirillo, G., Pereira, M. M., Eusébio, M. E. S., Calvete, M. J. F., *Structure-Property Study on the Degradation of Recalcitrant Trimethoprim Antibiotic by Tetrapyrrole-based Catalysts*, XXVI Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Porto, Portugal, 2019. **Poster.**

47. Pinto, S. M. A., Gomes, D. M. P., Tomé, V. A., Calvete, M. J. F., Abrunhosa, A. J., Geraldès, C. F. G. C., Pereira, M. M., *Synthesis of new chemical entities based on Tetrapyrrolic Macrocycles for Medical Imaging*, XXVI Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Porto, 2019. **Poster.**
48. Gomes, D. M. P., Pinto, S. M. A., Pereira, M. M., *Síntese de Potenciais Agentes Bimodais para Imagiologia Médica*, XXVI Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Porto, 2019. **Poster.**
49. Arnaut, Z. A., Aroso, R. T., Guedes, R. C., Pinto, S. M. V., Pereira, M. M., *The quest for new antibiotics: synthesis of potential DNA gyrase inhibitors*, XXVI Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Porto, 2019. **Poster.**
50. Gonzalez, A. C. S., Aroso, R. T., Dias, L. D., Carrilho, R. M. B., Pina, J., Pereira M. M., *Terpene-based metallophthalocyanines: Synthesis, characterization and catalytic applications in CO₂ activation*, XXVI Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Porto. **Poster.**
51. Aroso, R. T., Dabrowski, J. M., Pucelik, B., Dubin, G., Guedes, R. C., Arnaut, L. G., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., *Cationic photosensitizers and protein inhibitors: finding new ways to target antimicrobial resistance*, XXVI Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Porto, 2019. **Poster.**
52. Aroso, R. T., Pinto, S. M. A., Vinagreiro, C. S., Dias, L. D., Piccirillo, G., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., Paixão, F., *Investigação Científica E Educação: Mãos Dadas Para Combater Infeções Multirresistentes*, XVIII Encontro Nacional de Educação em Ciências, Porto, 2019. **Poster.**
53. Ciciliati, M. A., Eusébio, M. E. S., Ramos Silva, M., Cavalheiro, E. T. G., Castro, R. A. E., *A new salt of metoprolol and nicotinic acid*, IX Simpósio de Análise Térmica, Goiânia, 2019. **Poster**
54. Arnaut, L. G., *“A Química Fundamental e os Bens do Quotidiano · Uma Fita de Möbius”*, VI Jornadas de UBIQuímica, 3-4 Abril 2019, Universidade da Beira Interior, Covilhã. **Lição Convidada.**
55. Arnaut, L. G., *“Theory and practice in photodynamic therapy of cancer”*, Ciclo Antonio Xavier Seminars, 9 Maio 2019, ITQB Nova, Lisboa. **Lição Plenária.**
56. Mata, A. I., Cardoso, A. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., Gomes-da-Silva, L. C., Brito, R. M. M., *“Tumour-targeting Photodynamic Therapy: A Strategy to Increase Selectivity.”* 2019 Encontro de Jovens Investigadores em Biologia Estrutural e Computational, Lisbon, Portugal. (20th December, 2019). **Póster.**
57. Rodrigues, S. P. J., *Periodic Table and Theoretical and Computational Chemistry – A lesser known link*, XXVI Encontro Nacional de Química da Sociedade Portuguesa de Química – 150 anos 118 elementos, Tabela Periódica, Porto, 2019. **Comunicação Oral.**

58. Rodrigues, S. P. J., Apontamentos Historiográficos e Prosopográficos Sobre a Personagem do Cientista Louco, História Interdisciplinar da Loucura, Psiquiatria e Saúde Mental X, Coimbra, Portugal, 2019. **Comunicação Oral.**

59. Rodrigues, S. P. J., *Informal Dissemination of Chemistry in Controversial or Adverse Contexts*, SciCom, Aveiro, Portugal, 2019. **Poster.**

ORGANIZAÇÃO DE CONFERÊNCIAS CIENTÍFICAS E SEMINÁRIOS Nacionais e Internacionais

1. Valente, A. J. M., Membro do Scientific Committee da 4th International Conference on Biodegradable Polymers and Sustainable Composites (BIOPOL2019), Stockholm, Sweden, 2019.
2. Valente, A. J. M., Membro do Scientific Committee do 8th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces, Aveiro, 2019.
3. Ribeiro, A. C. F., Membro do Scientific Committee do 4th International conference on Food and Biosystems Engineering (FABE 2019), Agia Pelagia, Heraklion Crete Island, Greece, 2019.
4. Vitorino, C., Basso, J., Silva, J., Mendes, M., Cova, T., Organização do Workshop, Nanotechnology and brain drug delivery, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, Coimbra, Portugal, 2019.
5. Marques, J. M. C., Membro do Organizing Committee do Encontro sobre Estratégias Inteligentes para Química Computacional, Coimbra, Portugal, 2019.
6. Marques, J. M. C., Membro da Comissão Organizadora Nacional do XXVI Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Porto, Portugal, 2019.
7. Marques, J. M. C., Membro da Comissão Organizadora Nacional do Encontro de Ensino e Divulgação da Química, Coimbra, Portugal, 2019.
8. Abreu, P. E., Organizador do Encontro de Ensino e Divulgação da Química, Coimbra, Portugal, 2019.
9. Pineiro, M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Comissão Organizadora, Workshop “Estratégias de Descoberta de Fármacos”, Universidade de Coimbra, Coimbra, 2019.
10. Pineiro, M., Membro da Comissão Científica das XXIV Olimpíadas Ibero-americanas de Química, Universidade do Porto, Porto, 2019.
11. Pineiro, M., Membro da Comissão Organizadora das Semi-finas das Olimpíadas de Química Junior, Coimbra, 2019.
12. Geraldes, C., Brito, R. M. M., Cruz, P., NMR Focus 2019 – NMR in Health and Disease - From Protein-Ligand Interactions to Molecular Imaging, julho 2019. Coimbra, Portugal.
13. Moreno, M. J., Organizadora principal da WBC 2019 – Workshop on Biological Chemistry, Lipids & Proteins – Interactions for Life. October 2019, Casa Aido Santo, Nespereira, Portugal.
14. Loura, L. M. S., Co-organizador de simpósio, Prieto LXX XXL Lx Fest - a one-day symposium on the occasion of the academic jubilee of Manuel J. E. Prieto, Junho 2019 Lisboa, Portugal.

15. Salvador, A., Coordenador, Summer School on Computational Biology, Coimbra, 2019
16. Salvador, A., Membro da Comissão Científica Internacional, 16th International Conference in Molecular Systems Biology, Outubro 2019, Manila, Filipinas.
17. Salvador, A., Co-organizador de simpósio, 53rd Annual Scientific Meeting of the European Society for Clinical Investigation, Maio 2019, Coimbra, Portugal.
18. Vaz, D. C., Membro da Comissão Científica. 8^o Congresso Nacional de Biomecânica fevereiro 2019. Unhais da Serra, Covilhã, Portugal.
19. Fausto, R., VII Turkish National Congress on Inorganic Chemistry, Çorum, Turkey, 19-22 June 2019. (Member of the Scientific Committee)
20. Fausto, R., Analyticon 2019, Analytical and Bioanalytical Methods Conference, San Francisco CA, USA, 29 April - 1 May 2019. (Member of the Organizing Committee)
21. Fausto, R., Vth International Conference on Molecular Spectroscopy: From Molecules to Molecular Materials, Molecular Biological Systems and Nanostructures, Wojanów – Wrocław, Poland, 15-19 September 2019. (President of the International Committee)
22. Ildiz, G. O., International Conference on Molecular Spectroscopy and Biological Applications
Istanbul, Turkey, 17-18 June 2019 (President of the Organizing and of the Scientific Committees).
23. Fausto, R., International Conference on Molecular Spectroscopy and Biological Applications
Istanbul, Turkey, 17-18 June 2019 (Member of the Scientific Committee).
24. Reva, I., International Conference “*To Grasp the Whole World*” (dedicated to the 250th anniversary of Alexander von Humboldt), Lisbon, Portugal, 4-6 December 2019. (Member of the Organizing Committee)
25. Pereira, M. M., Organização do Seminário *Vencendo os Desafios da Saúde com Técnicas Fotónicas: Do Câncer ao Controlo Microbiológico e Segurança Alimentar*, por Prof. Doutor Vanderlei Bagnato, USP- Brasil), Departamento de Química, Universidade de Coimbra, Coimbra, 2019.
26. Pereira M. M., Organização do Encontro Inter-institucional do Projeto *DUALPI – Multidrug Resistant Bacteria. aPDT – Alternative Solutions*, Departamento de Química, Universidade de Coimbra, Coimbra, 2019.
27. Pereira, M. M., Calvete, M. J. F., Pinto, S. M. A., Carrilho, R. M. B., Vinagreiro, C., Piccirillo, G., Rodrigues, F., Damas, L., Tomé, V., Dias, L., Aroso, R., Comissão Organizadora das Olimpíadas de Química Júnior (semi-finais regionais), Coimbra, 2019.
28. Pereira, M. M., Membro da Comissão Organizadora Nacional, XXVI Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Porto, Portugal, 2019

-
29. Serpa, C., Organizador de Escola de Verão *Frontiers in Medicinal Chemistry*, Miranda do Corvo, Portugal, 2019.
30. Arnaut, L. G., Jesus, C. S. H., organizadores de *User Meeting Laserlab Europe*, Coimbra, Portugal, 2019.
31. Arnaut, L. G., organizador de simpósio no IPA World Congress, 28 de Junho a 4 de Julho de 2019, Boston, USA.
32. Maria, T. M. R., Membro do Comité Científico Internacional da *5th Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry / 14th Mediterranean Conference on Calorimetry and Thermal Analysis*, Roma, 2019.
33. Eusébio, M. E. S., Canotilho, J., Membros da Comissão Científica da *44th Conference on Phase Equilibria*, Agadir, 2019.
34. Rodrigues, S. P. J., Organização e Comissão Científica, The 1st International Congress on the History of Science in Education, UTAD, Vila Real, Portugal, 2019.
35. Rodrigues, S. P. J., Marques, J. M. C., Membro da Organização e Comissão Científica, Encontro de Ensino e Divulgação da Química, SPQ, UC e Escola Secundária Avelar Brotero, Coimbra, 2019.

TESES

Teses de Doutoramento

1. Andreia Isabel da Costa Romeiro, *Fotocatálise com óxidos metálicos semicondutores na degradação de fármacos e pesticidas em água*, Universidade de Coimbra 2019.

[Orientação: Azenha, M. E., Burrows, H. D.]

2. Alan Fernando Yoshiaki Matsushita, *Desenvolvimento de sondas baseadas em sistemas polielétrólito/iões lantanídeo*, Universidade de Coimbra, 2019.

[Orientação: Valente, A. J. M., Pais A. A. C. C.]

3. António Luís Gonçalves de Aguiar, *Novos materiais baseados em compostos pirrólicos para células solares orgânicas*, Universidade de Coimbra, 2019.

[Orientação: Sobral, A. J. F. N., Morgado, J.]

4. Diana Madelen Galindres Jimenez, *Estudio fisicoquímico de resorcinarenos sulfonados y su complejación con proteínas) Propiedades de transporte em farmacologia anti-tuberculose*, Tese de Doutoramento (cotutela), Universidade de Alcalá (Espanha) e Universidade de los Andes (Bogotá, Colombia), 2019.

[Orientação: Estesó, M. A., Ribeiro, A. C. F., Vargas, E. F.]

5. Telma Maria Borrego da Encarnação, *Microalgae Technology: sustainable transformation of emerging pollutants*, Universidade de Coimbra, 2019.

[Orientação: Pais A. A. C. C., Burrows, Campos, M. G.]

6. Wanderson S. Jesus, *Ion-rare-gas microsolvation studies by employing an evolutionary algorithm Terpene-based metallophthalocyanines: Synthesis, characterization and catalytic applications in CO₂ activation*, Doutoramento em Física, Universidade Federal da Bahia, 2019.

[Orientação: Prudente, F. V., Marques, J. M. C.]

7. Lucas Danilo Dias, *Development of Metal Catalysts for Activation of CO and CO₂. Synthesis of Small Ring Heterocycles with Potential Biological Activity*, Universidade de Coimbra, 2019.

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

8. Liliana Reis Damas, *Processos Sustentáveis de Carbonilação Catalisada por Metais para Funcionalização de Heterociclos*, Universidade de Coimbra, 2019.

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

Teses de Mestrado

1. Andreia Cristina da Silva Gonzalez, *Terpene-based metallophthalocyanines: Synthesis, characterization and catalytic applications in CO₂ activation*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2019.

[Orientação: Carrilho, R. M. B., Pina, J.]

2. Maria Pascoal Rodrigues de Tòvar Faro, *Raw Paper Functionalization for the development of a security paper*, Mestrado em Química Forense, Universidade de Coimbra, 2019.

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

3. Inês Lourenço de Carvalho, *Caracterização de vinhos de diferentes regiões vitivinícolas, estudo da sua oxidação, do efeito da aplicação de colas após oxidação e da dinâmica populacional de leveduras*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Valente, A. J. M., Simões, J. M. S.]
4. Cátia Sofia Mateus Esteves, *Study of psychoactive substances of natural origin by vibrational spectroscopy: Analysis and discrimination of magic mushrooms*, Mestrado em Química Forense, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Antunes, F. E., García, G. M.]
5. Ana Carolina Freitas de Jesus, *Síntese e Caracterização de Novos Surfactantes Derivados de açúcares para a aplicação industrial*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Antunes, F. E., Murinho, D.]
6. Maria Inês Ferreira, *Magnetic nanoparticles: A novel platform for cancer theranostics*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Vitorino, C.]
7. Miguel Ângelo Pereira Nunes Tavares, *Desenvolvimento farmacêutico de sistemas transdérmicos: estratégias e oportunidades*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Vitorino, C.]
8. Inês Maria de Almeida Lopes, *O papel da nanomedicine no tratamento do cancro do pulmão*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Vitorino, C.]
9. Mariana Silva Faria Peixoto, *Métodos Sustentáveis para a Síntese de Derivados de Porfirinas*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Pineiro, M.]
10. Joana Rita Cerveira Santos, *Síntese de Novos Esteroides Penta- e Haxacíclicos partindo de 1-Azadienos Esteroidais*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D., Co-orientação: Lopes, S. M. M.]
11. Elisa Gabriela Monteiro Ferreira, *A Validated Methodology for the Forensic Toxicological Analysis of Opioids in Biological Fluids using Solid Phase Extraction, Microwave Derivatization and Gas Chromatography-Mass Spectroscopy*, Mestrado em Química Forense, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Margalho, C., Co-orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D.]
12. Vanessa Filipa Maçana Martins, *Profiling de Estupefacientes: Profiling de Cocaína*, Mestrado em Química Forense, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Matias Teixeira, A. I.; Co-orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D.]

13. Alexandra Isabel Simões Fonseca, *Labelling and validation of [⁶¹Cu] DOTA-NOC for somatostatin receptor imaging*, Mestrado em Bioquímica, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Abrunhosa, A; Geraldes, C.F.G.C.]
14. Ana Beatriz Ramos Caniceiro, *O Papel dos Halogénios no Desenho de Fármacos*. Mestrado em Química Medicinal, Depart. de Química, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Brito, Rui M. M.]
15. Ana Carolina Lucas Branco, *Estudo da viabilidade de incorporação de Myrtus spp. em produtos alimentares*. Mestrado em Gestão da Qualidade e Segurança Alimentar, Escola Superior de Turismo e Tecnologia do Mar (ESTM-Peniche), IPLeiria, 2019.
[Orientação: Vaz, D. C.]
16. Alexander Michael Ribeiro Santos, Mestrado em Química Medicinal, Departamento de Química, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Brito, Rui M. M.]
17. Inês Garrido, *Formation of lipid nanodiscs through SMALPs to extract membrane proteins in their native lipid environment*, Mestrado em Bioquímica, Universidade do Porto, 2019.
[co-Orientação: Moreno, M. J.]
18. Taciana Raquel Bertotti, *Corema album (L.) D. Don Caracterização físico-química, capacidade antioxidante in vitro e perfil de ácidos gordos por cromatografia gasosa*. Mestrado em Gestão da Qualidade e Segurança Alimentar, Escola Superior de Turismo e Tecnologia do Mar (ESTM-Peniche), IPLeiria, 2019.
[Orientação: Vaz, D. C.]
19. José Paulo Lopes Roque, *Isomerismos Tautoméricos e Conformacionais Induzidos Fotoquimicamente em Compostos Heteroaromáticos Isolados em Matrizes Criogénicas*, Mestrado em Química (especialização em Química Avançada e Industrial), Setembro 2019.
[Orientação: Rosado, M. T. S., Reva, I.]
20. Andreia Margarido Tabanez, *Using the Optical Microscope Coupled Raman Spectroscopy Technique to Solve Research Problems in the Pharmaceutical Industry*, Mestrado em Química Avançada e Industrial, Universidade de Coimbra, 30 de Setembro de 2019.
[Orientação: Fausto, R.]
21. Ana Patrícia Ferreira da Silva Pereira, *Caracterização de Alfaias Religiosas da Coleção do Museu Nacional Machado de Castro*, Mestrado em Química Forense, Universidade de Coimbra, 30 de Setembro de 2019.
[Orientação: Fausto, R.]
22. Catarina Cardoso Páscoa, *Análise e Caracterização de Acendalhas por GC-MS*, Mestrado em Química Forense, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Assis, A. C., Marques, A., Pereira, M. M.]

23. Daniel Malva, *Estudo e caracterização de novos materiais piezofotónicos aprimorados com inovadores nanotubos de carbono funcionalizados*, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2019.

[Orientação: Serpa, C.]

24. Diana Margarida Pereira Gomes, *Síntese de Ligandos Nitrogenados e Complexos Metálicos com Potencialidade para Imagiologia Médica*, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2019.

[Orientação: Pereira, M. M., Pinto, S. M. A.]

25. Diogo António da Cruz Figueiredo Pereira, *Permeabilização de membranas por ultrassons de alta frequência. Mestrado em Química Medicinal*, Universidade de Coimbra, 2019.

[Orientação: Arnaut, L. G.]

26. José Paulo Lopes Roque, *Isomerismos Tautoméricos e Conformacionais Induzidos Fotoquimicamente em Compostos Heteroaromáticos Isolados em Matrizes Criogénicas*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2019.

[Orientação: Rosado, M. T. S., Co-orientação: Reva, I.]

27. Mélanie Silva Pinto, *Desenvolvimento e Validação de um Método Analítico para Voláteis com Produção Endógena em Situações de Putrefação*, Mestrado em Química Forense, Universidade de Coimbra, 2019

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

28. Sara Margarida Duarte Júlio, *Identificação, Síntese e Quantificação de Novas Substâncias Psicoativas*, Mestrado em Química Forense, Universidade de Coimbra, 2019.

[Orientação: Gaspar, H., Galla, M. G., Pereira, M. M., Barroso, M. J. D.]

Outras Teses (Estágio de Licenciatura)

1. Jacobo Piñeiro Diz, *Caracterização espectroscópica e fotofísica de metoxi-tetrafenilporfirinas de cobre*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2019.

[Orientação: Pina, J.]

2. Leonardo Filipe Kleman Santos, *Síntese de novos BODIPYs como agentes de fototerapia*, Departamento de Química, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2019.

[Orientação: Sobral, A. J. F. N.]

3. Bruna Catarina Moleano Veríssimo, *Abordagem computacional para o estudo de nanosistemas direcionados ao tratamento do olho seco*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2019.

[Orientação: Nunes, S. C. C., Pais, A. A. C. C.]

4. Beatriz da Silva Gonçalves, *Comparação de packages R para a análise não compartimental de dados farmacocinéticos*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2019.

[Orientação: Cova, T., Pais, A. A. C. C.]

5. José Miguel Coelho de Sousa, *Microsolvatação de iões: estrutura e estabilidade termodinâmica*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Marques, J. M. C.]
6. Carlos Daniel Figueira Coelho, *Estudo e caracterização de derivados de Xantenos*, Iniciação a Investigação e Desenvolvimento, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Abreu, P. E., Co-orientação Moreno, M. J.]
7. Laressa de Oliveira Leite, *Síntese de ligandos quirais derivados do ácido canfórico para catálise enantioselectiva*, Estágio Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Murtinho, D.]
8. Carolina Neves Reigota, *Desenvolvimento de uma estratégia de síntese assimétrica para a (R)-terbutalina*, Estágio da Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2019. [Orientação: Murtinho, D.]
9. Bruno Maurício Vigia, *Síntese de aminoálcoois quirais para utilização em adições de Michael enantioselectivas*, Estágio da Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Serra, M.E.S.]
10. Cecília Gabriela Marques Madeira, *Síntese de tiazolidinas derivadas da L-cisteína e aplicação em catálise assimétrica*, Estágio da Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Serra, M.E.S.]
11. Adelaide Santagata, *Síntese de um ligando quiral e utilização deste para o estudo de otimização de reações de oxidação do estireno para obter o epóxido correspondente*, Estágio da Licenciatura em Química (Erasmus), Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Serra, M.E.S.]
12. Catarina Urânia Ferreira Marques, *Spiro-lactams as New Antimicrobial Agents*, Estágio da Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D., Co-orientação: Soares, M. I. L.]
13. Soraia Filipa Drysdale Assis, *Compostos Heterocíclicos a Partir de Nitrosoalquenos*, Soraia Filipa Drysdale Assis, Estágio da Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D., Co-orientação: Lopes, S. M. M.]
14. Alexandre Pires Felgueiras, *Síntese Assimétrica de (2-Tetrazol-5-il)-2H-Azirinas via reação de Neber*, Estágio da Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D., Co-orientação: Cardoso, A. L.]
15. Bruna Diana Paiva Costa, *Novos Macrociclos Tetrapirrólicos do Tipo Clorina como Agentes Fotossensibilizadores para Terapia Fotodinâmica de Cancro*, Estágio da Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D., Co-orientação: Pereira, N. A. M.]

16. Aida T. Carrasco González, *Estudo de processos de agregação do peptídeo beta-amilóide e da proteína transtirretina*. Licenciatura em Bioquímica, Departamento de Química, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Brito, R. M. M.]
17. Joana Margarida Ferreira dos Santos, *Estágio Laboratorial no Serviço de Patologia Clínica do Instituto Português de Oncologia de Coimbra Francisco Gil (IPOCFG)*, Projecto da Licenciatura em Bioquímica, Universidade de Coimbra, 2019
[Co-orientação: Castro, M. M.]
18. Margarida Cordeiro, *Caracterização do comportamento ácido-base da HOECHST 33342 esua interação com biomembranas. Um estudo por absorção e fluorescência no UV-vis*, Licenciatura em Química, 2019.
[Orientação: Moreno, M. J.]
19. Margarida Gonçalves Susana, *Análise das Propriedades Cinéticas da Peroxiredoxina 2*, Estágio Científico da Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2019
[Orientação: Salvador, A.]
20. Iori Miura, *Computational Design of Molecular Switches for Vibrational Excitation Control*, Estágio IAESTE, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Nunes, C. M.]
21. Gil Almeida Ferreira, *Isomerização Conformacional Induzida por Excitação Vibracional do Segundo Sobretom do Modo de Elongação OH da Glicolamida*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, Setembro 2019.
[Orientação: Nunes, C. M., Fausto R.]
22. Adelaide da Silva Pessoa, *Síntese de Catalisadores para Potencial Aplicação em Remediação Ambiental*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Pereira, M. M., Calvete, M. J. F.]
23. Iúri Emanuel Afonso Tavares, *Síntese de Derivados de Terpenos com Potencial Atividade Biológica*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Pereira, M. M., Carrilho, R. M. B.]
24. Zoe Ladieu Arcas Arnaut Moreira, *Design e síntese de sintões para desenvolvimento de compostos com potencial atividade antimicrobiana para a girase B*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Pereira, M. M., Pinto, S. M. A.]
25. Andreia Filipa Marreiros Amaro, *“A importância do TFEB/E3 na indução da autofagia e/ou ER stress na terapia fotodinâmica com redaporfin.”*, Licenciatura Química Medicinal, Departamento de Química da Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Gomes-da-Silva, L. C.]
26. Luis Rodrigues, *“Avaliação de BODIPYs para terapia fotodinâmica.”*, Licenciatura em Biotecnologia, Escola Superior Agrária de Coimbra, 2019.
[Orientação: Gomes-da-Silva, L. C.]

27. Daniela Amado Santos, *Agregados de proteínas e a sua fluorescência na região do visível*, Licenciatura em Química Medicinal, 2019.
[Orientação: Serpa, C., Jesus, C. S. H.]
28. Carolina Filipa de Oliveira Guardado, *Permeações cutâneas de formulações contendo Minoxidil*, Licenciatura em Química Medicinal, 2019.
[Orientação: Serpa, C.]
29. Carolina Baptista Ribeiro Simões, *Varição conformacional do peptídeo Chignolin após protonação*, Licenciatura em Química Medicinal, 2019.
[Orientação: Serpa, C., Jesus, C. S. H.]
30. Tiago B. Pinto, *Pares dador-aceitador de electrão: Estudo de complexos de transferência de carga*, Licenciatura em Química, 2019.
[Orientação: Serpa, C.]
31. Ana Patrícia Cruz de Matos, *Caracterização fotoacústica de ftalocianinas com absorção na janela terapêutica como agentes de contraste para tomografia fotoacústica*. Licenciatura em Química Medicinal, 2019.
[Orientação: Arnaut, L. G., Schaberle, F.]
32. Joana Sofia da Silva Duarte, *Mechanisms of cell death in PDT*. Licenciatura em Química Medicinal, 2019.
[Orientação: Arnaut, L. G.]
33. Pedro Nuno Sousa Leite da Silva, *Investigação de formas sólidas de um fármaco usado no tratamento da artrite reumatóide: iguratimode*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Eusébio, M. E. S., Maria, T. M. R.]
34. Joana de Oliveira da Gama de Mascarenhas, *Estado sólido de ativos farmacêuticos: estudos sobre bicalutamida e pitavastatina*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Eusébio, M. E. S.]
35. Ana Margarida Almeida Marques, *Investigação de sólidos multicomponentes de diflunisal e de naproxeno com isoniazida*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Eusébio, M. E. S., Canotilho, J.]
36. Ana Rita Rosa Leirião, *Formas sólidas multicomponente de ativos farmacêuticos: aminoácidos como co-formadores*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Eusébio, M. E. S.]
37. Inês Caria Santos, *Nano Co-Cristais Farmacêuticos: Síntese e Caracterização*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, Universidade de Coimbra, 2019.
[Orientação: Castro, R. A. E., Eusébio, M. E. S.]

38. Ana Luísa Pereira Meda, *Epigenética: Uma nova abordagem ao envelhecimento cutâneo*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade de Coimbra, 2019.

[Orientação: Castro, R. A. E.]

39. Ana Margarida Diogo Sequeira, *Farmacologia, Dieta e Suplementação na Perturbação de Hiperatividade com Défice de Atenção: o que sabemos até agora e perspetivas futuras*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade de Coimbra, 2019.

[Orientação: Castro, R. A. E.]

40. Inês Rodrigues Lousa, *Nanopartículas de ouro aplicadas à terapia do cancro da mama*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade de Coimbra, 2019.

[Orientação: Castro, R. A. E.]

41. Diogo Miguel Lopes Dias, *Ectoparasitoses em cães e gatos: eficácia e segurança do Fipronil e do Imidaclopride*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade de Coimbra, 2019.

[Orientação: Canotilho, J.]

42. Catarina Martins Pinto Diogo, *Uma nova abordagem no tratamento da psoríase: Excimer Laser System*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade de Coimbra, 2019.

[Orientação: Canotilho, J.]

43. Luís Miguel Carapinha Bastos, *Co-cristais farmacêuticos em quimioterapia oral*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade de Coimbra, 2019.

[Orientação: Canotilho, J.]



PATENTES

1. *Dual nanostructured lipid carrier as a multifunctional platform for brain tumor therapy*, PT patent application no. 20191000061501. Inventores: C. Vitorino, A. Pais, J. Sousa, A. F. Falcão, A. Fortuna, T. Cova, S. Nunes, J. Torres, M. Mendes, A. Almeida, L. Gonçalves. Requerentes: Universidade de Coimbra e Faculdade de Farmácia da Universidade de Lisboa. Pedido de patente nº 20191000061501, em **Portugal**.

2. 2-Thioxothiazolidin-4-one Derivatives Active as Transthyretin Ligands and Uses Thereof. Office: **United States of America**. Application Number: 15528589. Application Date: 20.11.2015. Publication Number: 20190092737. Publication Date: 28.03.2019

3. Bis-furan derivatives as transthyretin (TTR) stabilizers and amyloid inhibitors for the treatment of familial amyloid polyneuropathy (FAP). 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. **United States** Patent number 10377729; Filed: June 15, 2016; Date of Patent: August 13, 2019.

4. *Processo de obtenção de superfícies poliméricas funcionalizadas com fotossensibilizadores, material polimérico funcionalizado e seu uso*. A. C. Zangirolami, V. S. Bagnato, L. D. Dias, N. M. Inada, C. S. Vinagreiro, L. G. Arnaut Moreira, M. M. Pereira, K. C. Blanco. University of São Paulo and University of Coimbra. **BR** patent application no BR1020190146818, 16/07/2019.

5. *Small cationic ortho-5,15-di-heteroaryl-porphyrin derivatives and their applications in photoinactivation of microorganisms*. M. M. Pereira, G. C. D. J. da Silva, L. G. Arnaut Moreira, C. S. Vinagreiro, K. C. Blanco, V. S. Bagnato, N. M. Inada. University of Coimbra and University of São Paulo. **PT** patent application no. PT/20191000032263, 14/06/2019.

6. *Atropisomers of halogenated tetraphenyl bacteriochlorins and chlorins and their use in photodynamic therapy*, N. P. F. Gonçalves, T. P. C. M. Santos, G. P. N. Costa, C. J. P. Monteiro, F. A. Schaberle, S. C. Alfar, A. C. R. Abreu, M. M. Pereira, L. G. Arnaut Moreira, Luzitin SA e Universidade de Coimbra. Patente nº 2017/06642. Data de concessão na **África do Sul**: 30/01/2019.

7. *Low molecular weight derivatives of carboxamide halogenated porphyrins, namely chlorins and bacteriochlorins, and their applications thereof*. G. P. N. Costa, C. J. P. Monteiro, N. P. F. Gonçalves, A. C. R. Abreu, H. T. S. Soares, L.G. B. Rocha, F. A. Schaberle, L. G. Arnaut Moreira, M. M. Pereira, Luzitin SA e Universidade de Coimbra. US Patent 10,450,322. Data de concessão nos **Estados Unidos**: 22/10/2019

8. *Low molecular weight derivatives of carboxamide halogenated porphyrins, namely chlorins and bacteriochlorins, and their applications thereof.* G. P. N. Costa, C. J. P. Monteiro, N. P. F. Gonçalves, A. C. R. Abreu, H. T. S. Soares, L.G. B. Rocha, F. A. Schaberle, L. G. Arnaut Moreira, M. M. Pereira, Luzitin SA e Universidade de Coimbra.

EP3292129. Data de concessão na **Europa**: 23/03/2019

9. *Low molecular weight derivatives of carboxamide halogenated porphyrins, namely chlorins and bacteriochlorins, and their applications thereof.* G. P. N. Costa, C. J. P. Monteiro, N. P. F. Gonçalves, A. C. R. Abreu, H. T. S. Soares, L.G. B. Rocha, F. A. Schaberle, L. G. Arnaut Moreira, M. M. Pereira, Luzitin SA e Universidade de Coimbra.

EP3292129. Data de concessão na **Alemanha**: 23/03/2019

10. *Low molecular weight derivatives of carboxamide halogenated porphyrins, namely chlorins and bacteriochlorins, and their applications thereof.* G. P. N. Costa, C. J. P. Monteiro, N. P. F. Gonçalves, A. C. R. Abreu, H. T. S. Soares, L.G. B. Rocha, F. A. Schaberle, L. G. Arnaut Moreira, M. M. Pereira, Luzitin SA e Universidade de Coimbra.

EP3292129. Data de concessão em **França**: 23/03/2019

11. *Low molecular weight derivatives of carboxamide halogenated porphyrins, namely chlorins and bacteriochlorins, and their applications thereof.* G. P. N. Costa, C. J. P. Monteiro, N. P. F. Gonçalves, A. C. R. Abreu, H. T. S. Soares, L.G. B. Rocha, F. A. Schaberle, L. G. Arnaut Moreira, M. M. Pereira, Luzitin SA e Universidade de Coimbra.

EP3292129. Data de concessão no **Reino Unido**: 23/03/2019