

## INDICADORES DE DESEMPENHO CIENTÍFICO CQC – 2018

### LIVROS E CAPÍTULOS DE LIVROS

1. Fausto, R., Ogruc-Ildiz, G., Brás, E. M., Nogueira, B. A., *Hydantoins and Mercaptoimidazoles: Vibrational Spectroscopy as a Probe of Structure and Reactivity in Different Environments, from the Isolated Molecule to Polymorphs*, em *Molecular Spectroscopy – Experiment and Theory – From Molecules to Functional Materials, Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics*, (Eds. Kolezynski, A., Krol, M.), Springer-Nature International Publishers, Amsterdão (Holanda), Vol. 26, Capítulo 7, pp. 199-222, 2018.  
ISBN: 978-3-030-01354-7.
2. Fausto, R., Unsalan, O., Ogruc-Ildiz, G., Eds., *J. Mol. Struct.* (número especial: *TURCMOS 2017 - A Collection of Invited Papers Presented at the 3rd International Turkish Congress on Molecular Spectroscopy*), Elsevier Science, Amsterdão, Holanda, *J. Mol. Struct.*, 1174, pp. 1-192, 2018.  
HTTPS: [www.sciencedirect.com/journal/journal-of-molecular-structure/vol/1174](https://www.sciencedirect.com/journal/journal-of-molecular-structure/vol/1174)  
DOI: 10.1016/j.molstruc.2018.07.044
3. Fausto, R., Nunes, C. M., Gundmundsdottir, A., Eds., *J. Mol. Struct.* (Número especial: *Structure, Spectroscopy and Chemistry of Reactive Intermediates*), Elsevier Science, Amsterdão, Holanda, *J. Mol. Struct.*, 1172, pp. 1-118, 2018.  
HTTPS: [www.sciencedirect.com/journal/journal-of-molecular-structure/vol/1172](https://www.sciencedirect.com/journal/journal-of-molecular-structure/vol/1172)  
DOI: 10.1016/j.molstruc.2018.06.027
4. Rocha-Filho, R. C., Fausto, R., *Grandezas, Unidades e Símbolos em Físico-Química - (Livro Verde)*, Tradução atualizada para o Português (nas variantes brasileira e portuguesa) da 3ª edição em Inglês *Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry - (Green Book)*, preparado para publicação por Richard Cohen, E., Cvitaš, T., Frey, J. G., Holmström, B., Kuchitsu, K., Marquardt, R., Mills, I., Pavese, F., Quack, M., Stohner, J., Strauss, H. L., Takami, M., Thor, A. J., São Paulo, Brasil, pp. 1-252, 2018.  
ISBN 978-0-85404-433-7.
5. Fausto, R., Brás, E. M., Justino, L. L. G., Nogueira, B. A., Eds., *XXXIV European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS 2018) – Book of Abstracts*, Departamento de Química FCTUC, Coimbra, pp. 1-10, 2018.  
ISBN: 978-989-20-8611-8.
6. Pereira, M. M., Calvete, M. J. F., Eds., *Sustainable Synthesis of Pharmaceuticals (using transition metals as catalysts)*, RSC Green Chemistry Series nº 54, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, pp. 1-286, 2018.  
ISBN: 978-1-78262-934-4  
eISBN: 978-1-78801-441-0  
ISSN: 1757-7039
7. Pereira, M. M., *Applications of Catalytic Hydroformylation in the Synthesis of Biologically Relevant Synthons and Drugs*, in *Sustainable Synthesis of Pharmaceuticals: Using Transition*

*Metal Complexes as Catalysts*, Pereira, M. M., Calvete M. J. F., Eds., The Royal Society of Chemistry, Cambridge, pp. 66-104, 2018.

ISBN: 978-1-78262-934-4

DOI: 10.1039/9781788010658-00066

8. Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., *Introduction to Sustainable Synthesis of Pharmaceuticals*, in *Sustainable Synthesis of Pharmaceuticals (using transition metals as catalysts)*, Pereira, M.M., Calvete, M. J. F., Eds., RSC Green Chemistry Series n° 54, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, pp. 1-4, 2018.

ISBN: 978-1-78262-934-4

eISBN: 978-1-78801-441-0

URL:<http://dx.doi.org/10.1039/9781788010658-00001>

9. Pereira, M. M., Vinagreiro, C. S., Rodrigues, F. M. S., Carrilho, R. M. B., *Palladium-Catalyzed Asymmetric Transformations of Natural Products and Drug Molecules*, in *Asymmetric Synthesis of Drugs and Natural Products*, Ahindra Nag Ed., CRC Press, Taylor & Francis Ltd, Boca Raton, Chap. 10, pp. 293-324, 2018.

ISBN: 978-1-13-803361-0.

eISBN: 978-1-31530-230-0

10. Pereira, M. M., Carrilho, R. M. B., Calvete, M. J. F., *Tervalent Phosphorus Acid Derivatives*, in *Organophosphorus Chemistry* Volume 47, Allen, D. W., Loakes, D., Tebby, J. C. Eds., Specialist Periodical Reports Series, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, pp 96-156, 2018.

ISBN: 978-1-78801-167-9;

PDF eISBN: 978-1-78801-305-5;

ePub eISBN: 978-1-78801-463-2

URL: <http://dx.doi.org/10.1039/9781788013055-00096>

11. Pineiro, M., Calvete, M. J. F., *Sustainable Synthesis of Pharmaceuticals using Alternative Techniques: Microwave, Sonochemistry and Mechanochemistry*, in *Sustainable Synthesis of Pharmaceuticals, Using Transition Metal Complexes as Catalysts*, Pereira, M. M., Calvete, M. J. F., Royal Society of Chemistry, Green Chemistry book series, Chap. 3, pp. 8-39, 2018.

ISBN: 978-1-78262-934-4

12. 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*, Pourhashemi, A., Deka, S. C., Haghi, A. K., New Jersey, USA: Apple Academic Press, Inc./CRC, Chap. 7, 2018.

ISBN: 978-1-77188-768-7

13. Cova, T. F. G. G., Cruz, S. M. A., Valente, A. J. M., Abreu, P. E., Marques, J. M. C., Pais, A. A. C. C., *Aggregation of Cyclodextrins: Fundamental issues and applications*, in *Cyclodextrin - A Versatile Ingredient*, Arora P. Ed., IntechOpen, Rijeka, Chap 2, pp. 45-65, 2018.

10.5772/intechopen.73532

ISBN: 978-1-78923-069-7

14. Medronho, B., Gonçalves, S., Rodríguez-Solana, R., Valente, A. J. M., Romano, A. Interactions between bio-based compounds and cyclodextrins, in *Cyclodextrin - A Versatile Ingredient*, Arora P. Ed., IntechOpen, Rijeka, Chap 3, pp. 69-93, 2018.  
10.5772/intechopen.73531  
ISBN: 978-1-78923-069-7
15. Gerola, A. P., Rubira, A. F., Muniz, E. C., Valente, A. J. M., *Gum Arabic: A Remarkable Biopolymer for Food and Biomedical Applications*, in *Engineering Technology and Industrial Chemistry with Applications*, Haghi, R., Torrens, F. Eds., AAP, New York, Chap 14, pp. 263-294, 2018.  
ISBN: 978-1-77188-637-6
16. Marques, J. M. C., Jesus, W. S., Prudente, F. V., Pereira, F. B., Lourenço, N., *Revealing Energy Landscapes of Atomic Clusters by Applying Adaptive Bio-Inspired Algorithms*, in *Physical Chemistry for Chemists and Chemical Engineers Multidisciplinary Research Perspectives*, Vakhrushev, A. V., Haghi, R., de Julián-Ortiz, J. V. (eds.), Innovations in Physical Chemistry: Monograph Series, Apple Academic Press, New York, Chapter 3, pp 47-74, 2018.  
ISBN: 9781351379243
17. Cova, T. F., Nunes, S. C., Milne, B., Pais, A. A. C. C., *Modeling Soft Supramolecular Nanostructures by Molecular Simulations In Molecular Dynamics*, Chapter 2, pp. 1-34, 2018.  
DOI: 10.5772/intechopen.74939
18. Mendes, M., Sousa, J., Pais, A. A. C. C., Vitorino, C., *Clinical applications of nanostructured drug delivery systems: From basic research to translational medicine*. In: Maria Letizia Focarete and Anna Tampieri (Eds), *Core-Shell nanostructures for drug delivery and theranostics*, Woodhead Publishing, Chapter 4, pp. 43-116, 2018.  
DOI: 10.1016/B978-0-08-102198-9.00004-1
19. Silva, J., Miranda, A., Sousa, J., Pais, A. A. C. C., Vitorino, C., *Impact of immunotherapy in the treatment of glioblastoma*. In: Ming-Kung Yeh (Ed), *Biopharmaceuticals*, pp. 65-84, 2018.  
DOI: 10.5772/intechopen.78603
20. Burrows, H. D., Scientific Editor, *Pure and Applied Chemistry*, vol. **90**, pp. 1-2092, 2018.  
ISSN: 1365-3075
21. Ramos, M. L., Justino, L. L. G., Cruz, P. F., Burrows, H. D., *“Peroxocomplexes of some transition metal ions with  $d^0$  electronic configurations - Structural and reactivity considerations”*, in *Innovations in Physical Chemistry*, volume 6, *Innovations in Physical Chemistry, Engineering Technology and Industrial Chemistry with Applications*, Chapter 11, Ed. R. K. Haghi and F. Torrens, Apple Academic Press, Toronto, New Jersey, pp 209-234, 2019. (2018, publicado em 2019).  
ISBN: 978-1-315-10044-9
22. Campos, M. G., Bento, C., Zorrinho, I., Leite, A. P., *Interactions between drugs and herbal teas*. In *Food Drug Interactions*. Ramos F., Vitoria, I., Caramona, M., Chap. 9. Ed. pp. 207-225, 2018.  
ISBN: 978-1-53613-553-4. eBook

23. Vieira, E. F. M., Campos, M. G., Lucas, F. C. A., *The case of mururé (Brosimum acutifolium Huber) in the treatment of syphilis in colonial Amazonia: Historical data and their contribution to present medicine*. In *Book of Ethnobotany* Chap. 1. pp 1-18. Ed. Mahendra Rai, India. 2018 ISBN: 13:978-1-138-38898-7
24. Burrows, H. D., Campos, M. G., Delattre, C., Dupré, C., Encarnação, T., Fauchon, M., Gaignard, C., Hellio, C., Ito, J., Laroche, C., Legrand, J., Michaud, P., Pais, A. A. C. C., Pierre, G., Serive, B., Watanabe, M. M., *VI-Secondary metabolites analysis* (Telma Encarnação, Alberto A.C.C. Pais, Maria G. Campos, Hugh D. Burrows) In Chapter 2: *Microalgal biomass of industrial interest: methods of characterization*. In Ed. Jack LEGRAND, Chapter 2, pp. 1-98, 2018.
25. Seixas de Melo, J. S., *The Molecules of Colour*, in *Photochemistry*, Albini, A.; Fasani, E.; Protti, S., Eds. The Royal Society of Chemistry, London, UK, Vol. 45, pp 68-100, 2018.  
DOI: 10.1039/9781788010696.
26. 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 25 °C*, (Chap. 7) in the *Research Methods and Applications in Chemical and Biological Engineering*. Pourhashemi, A., Deka, S. C., Hagui, A. K., Eds, Apple Academic Press, New Jersey, USA. Inc./CRC. Chapter 7, pp. 1-334, 2018.  
ISBN: 9781771887687
27. Haghi, A. K., Pogliani, L., Ribeiro, A. C. F., (editors), *Innovations in Physical Chemistry: fourteen (14) Monograph Series*, Apple Academic Press. Toronto, New Jersey. 2018/2019.
28. Rodrigues, S. P. J., *A química dos objetivos do desenvolvimento das Nações Unidas*, III Congresso Internacional, Educação, Ambiente de Desenvolvimento. Oliveira, Mário, Carvalho, Nuno et al. (Eds.) Oikos e Instituto Politécnico de Leiria, 2018.  
E-book (in press).
29. Rodrigues, S. P. J. *Vinhetas, anedotas e estórias da história química em sala de aula (e sociedade)*, in *Narrativas em História da Ciência*, Adriano, Carlos (ed.), Novas Edições Académicas, pp. 58-68, 2018,  
ISBN: 978-620-2-19016-9
30. Caridade, P. J. S. B., Gouveia-Caridade, C. Caridade, Paulo J. S. B., *Copernicus Helping Civil Protection*, in *Copernicus4Regions*, European Commission, the European Space Agency and the Network of European Regions Using Space Technologies, pp 220 eds., 2018.  
[http://esamultimedia.esa.int/docs/EarthObservation/copernicus4regions\\_2018.pdf](http://esamultimedia.esa.int/docs/EarthObservation/copernicus4regions_2018.pdf)
31. Caridade, P. J. S. B., Gouveia-Caridade, C. Caridade, Paulo J. S. B., *GOSAFE/Outdoor Experience*, European Space Agency (ARTES) Technical Report (2018).  
Industrial Confidentiality.
32. Gerald, C. F. G. C., Lacerda, S., Tóth, É., *Molecular Probes for Magnetic Resonance Imaging of Amyloid Peptides*, in *Elsevier Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering*, J. Reedijk Ed., Elsevier, Waltham (MA), 2018.  
DOI: 10.1016/B978-0-12-409547-2.13926-5  
ISBN: 978-0-12409-547-2

33. Ramos, M. L., Justino, L. L. G., Cruz, P. F., Burrows, H. D., *Peroxo-complexes of some transition metal ions with d0 electronic configurations – Structural and reactivity considerations*. In *Engineering Technology and Industrial Chemistry with Applications*, Reza K. Haghi, Francisco Torrens Eds., Apple Academic Press, NJ, USA, Chap. 11, pp. 1-17, 2018. ISBN: 978-1-77188-637-6

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

1. Jesus, C. S. H., Cruz, P. F., Arnaut, L. G., Brito, R. M. M., Serpa, C., *One Peptide Reveals the Two Faces of  $\alpha$ -Helix Unfolding-Folding Dynamics*, *J. Phys. Chem. B*, 22, pp 3790-3800, 2018. DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b00229
2. Zhou, H., Mondragón, L., Xie, W., Mauseth, B., Leduc, M., Sauvat, A., Gomes-da-Silva, L. C., Forveille, S., Iribarren, K., Souquere, S., Bezu, L., Liu, P., Zhao, L., Zitvogel, L., Sveinbjörnsson, B., Eksteen, J. J., Rekdal, Ø., Kepp, O., Kroemer, G., *“Oncolysis with DTT-205 and DTT-304 generates immunological memory in cured animals.”* *Cell Death Dis.* 23, pp 1086-1100, 2018. DOI: 10.1038/s41419-018-1127-3
3. Gomes-da-Silva, L. C., Jimenez, A. J., Sauvat, A., Xie, W., Souquere, S., Divoux, S., Storch, M., Sveinbjörnsson, B., Rekdal, Ø., Arnaut, L. G., Kepp, O., Kroemer, G., Perez, F., *Recruitment of LC3 to damaged Golgi apparatus*, *Cell Death Diff.*, (2018) in press. DOI: 10.1038/s41418-018-0221-5
4. Gomes-da-Silva, L. C., Zhao, L., Arnaut, L. G., Kroemer, G., Kepp, O., *Redaporfin induces immunogenic cell death by sepective destruction of the endoplasmic reticulum and the Golgi apparatus*, *Oncotarget.*, 9, pp 31169-31170, 2018. DOI: 10.18632/oncotarget.25798
5. Gomes-da-Silva, L. C., Zhao, L., Bezu, L., Zhou, H., Sauvat, A., Liu, P., Durand, S., Leduc, M., Souquere, S., Loos, F., Mondragón, L., Sveinbjörnsson, B., Rekdal, Ø., Boncompain, G., Perez, F., Arnaut, L. G., Kepp, O., Kroemer, G., *Redaporfin targets the Endoplasmatic reticulum and the Golgi apparatus*. *EMBO J.* 37, pp 1-18, 2018. DOI: 10.15252/embj.201798354
6. Bezu, L., Sauvat, A., Humeau, J., Gomes-da-Silva, L. C., Iribarren, K., Forveille, S., Garcia, P., Zhao, L., Liu, P., Senovilla, L., Kepp, O., Kroemer, G., *eIF2 $\alpha$  is pathognomonic for immunogenic cell death*. *Cell Death Differ.* 25, pp 1375-1393, 2018. DOI: 10.1038/s41418-017-0044-9.
7. Freire-dos-Santos, M. J., Carvalho, R., Arnaut, L. G., *Split-face, randomized, placebo-controlled, double-blind study to investigate passive versus active dermal filler administration*, *Aesth. Plast. Surg.*, 42, pp 1655-1663, 2018. DOI: 10.1007/s00266-018-1208-9

8. Mentel, K. K., Serra, A., Abreu, P., Arnaut, L. G., *Higher Activation Barriers Lift Exothermic Rate Restrictions in Electron Transfers and Enable Faster Reactions*, *Nature Commun.*, 9, pp 2903, 2018.  
DOI: 10.1038/s41467-018-05267-5
9. Hamdan, I. M. N., Tekko, I. A., Matchett, K. B., Arnaut, L. G., Silva, C. S., McCarthy, H. O., Donnelly, R. F., *Intradermal delivery of a near infrared photosensitiser using dissolving microneedle arrays*, *J. Pharm. Sci.*, 107, pp 2439-2450, 2018.  
DOI: 10.1016/j.xphs.2018.05.017
10. Luz, A. F. S., Pucelik, B., Pereira, M. M., Dabrowski, J. M., Arnaut, L. G., *Translating phototherapeutic indices from in vitro to in vivo photodynamic therapy with bacteriochlorins*, *Lasers Surg. Med.*, 50, pp 451-459, 2018.  
DOI: 10.1002/lsm.22931
11. Schaberle, F. A., *Assessment of the actual light dose in photodynamic therapy*, *Photodiagnosis and Photodynamic Therapy*, 23, pp 75-77, 2018.  
DOI: 10.1016/j.pdpdt.2018.06.009
12. Lapinski, L., Reva, I., Gerega, A., Nowak, M. J., Fausto, R., *UV-induced Transformations of Matrix-Isolated 6-Azacytosine*, *J. Chem. Phys.*, 149, pp 104301, 2018.  
DOI: 10.1063/1.5045735
13. Nunes, C. M., Pinto, S. M. V., Reva, I., Rosado, M. T. S., Fausto, R., *Photochemistry of Matrix-Isolated 3-Chloro-1,2-Benzisoxazole: Generation and Characterization of 2-Cyanophenoxy Radical and Other Reactive Intermediates*, *J. Mol. Struct.*, 1772, pp 33-41, 2018.  
DOI: 10.1016/j.molstruc.2017.11.009
14. Lamsaf, H., Fausto, R., Costa, B. F. O., Toyir, J., Elghadraouia, E. H., Ijjaali, M., Oulmekki, A., *Synthesis and Physicochemical Characterization of a New Mixed-Valence Iron(III)-Zinc(II) Diphosphate:  $Zn^{2+}Fe_3^{+2}(P_2O_7)_2$* , *Mat. Chem. Phys.*, 216, pp 22-27, 2018.  
DOI: 10.1016/j.matchemphys.2018.05.060
15. Lamsaf, H., Soares, M. I. L., Pinto, S. M. V., Brás, E. M., Henriques, M. S. C., Paixão, J. A., Oulmekki, A., Elghadraoui, E. H., Fausto, R., *Molecular and crystal structures and spectroscopic properties of 2-oxo-2-(Thiophen-2-yl) ethyl phosphonic acid*, *J. Mol. Struct.*, 1178, pp 73-81, 2018.  
DOI: 10.1016/j.molstruc.2018.10.015
16. Lamsaf, H., Oulmekki, A., Elghadraoui, E. H., Fausto, R., Costa, B. F. O., *Synthesis and Physicochemical Characterization of a New Mixed-Valence Pyrophosphate:  $Cu_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2(P_2O_7)_2$* , *J. Phys. Chem. Solids.*, 119, pp 122-125, 2018.  
DOI: 10.1016/j.jpcs.2018.03.040
17. Issaoui, H., Benali, A., Bejar, M., Dhahri, E., Costa, B. F. O., Kuş, N., Nogueira, B. A., Fausto, R., *Structural, Morphological, Raman and Mössbauer Studies on  $(La_{0.8}Ca_{0.2})_{1-x}Bi_xFeO_3$  ( $x= 0.0, 0.1, 0.2$ ) Compounds*, *J. Supercond. Novel Magnet.* pp 1-11, 2018.  
DOI: 10.1007/s10948-018-4850-1

18. Nogueira, B. A., Fausto, R., *Coimbra Laser Lab: Raman Spectroscopy applied to the study of the Treasure of the Queen Saint Isabel*, *LaserLab Forum*, 25, pp 7, 2018.  
DOI: - Revista, *LaserLab Forum*, julho 2018
19. Nunes, C. M., Gudmundsdottir, A., Fausto, R., *Structure, Spectroscopy and Chemistry of Reactive Intermediates*, *J. Mol. Struct.*, 1172, pp 1-2, 2018.  
DOI: 10.1016/j.molstruc.2018.06.027
20. Fausto, R., Ogruc-Ildiz, G., Ünsalan, O., *Molecular Spectroscopy and Molecular Structure- Selected Communications Presented at the 3rd International Turkish Congress on Molecular Spectroscopy (TURMOS 2017)*, *J. Mol. Struct.*, 1174, pp 1-2, 2018.  
DOI: 10.1016/j.molstruc.2018.07.044
21. Kumar, G., Kumar, R., Ogruc-Ildiz, G., Fausto, R., Husain, A., *Structure, Spectroscopic Properties and Catalytic Activity for Epoxide Ring-Opening of Nickel Methylxanthate*, *J. Mol. Struct.*, 1177, pp 33-46, 2018.  
DOI: 10.1016/j.molstruc.2018.09.034
22. Golbedaghi, R., Fausto, R., Salehzadeh, S., Tofani, M., Safaraabadi, S., *Macrocyclic Mononuclear Ni(II) and Macroacyclic Tetranuclear Cu(II) Complexes: Dimerization of Binuclear Cu(II) Complexes with Help of Perchlorate Anions*, *Inorg. Chim. Acta.*, 480, pp 27-32, 2018.  
DOI: 10.1016/j.ica.2018.05.005
23. Lamsaf, H., Oulmekki, A., Elghadraoui, E. H., Fausto, R., Wagner, F. E., Costa, B. F. O., *Magnetic Studies on Two New Mixed Valence Phosphates  $Zn^{2+}Fe_2^{3+}(P_2O_7)_2$  and  $Zn_{0.5}^{2+}Cu_{0.5}^{2+}Fe_2^{3+}(P_2O_7)_2$* , *J. Supercond. Nov. Magnet.*, pp 1-6, 2018.  
DOI: 10.1007/s10948-018-4848-8
24. Golbedaghi, R., Fausto, R., *Coordination Aspects in Schiff Bases Cocrystals*, *Polyhedron*, 155, pp 1-12, 2018.  
DOI: 10.1016/j.poly.2018.06.049
25. Brás, E. M., Henriques, M. S. C., Paixão, J. A., Fausto, R., *High Z' Crystal Structure of a New Polymorph of a Thioimidazole Disulfide: Importance of Conformational Flexibility*, *Cryst. Growth & Design*, 18, pp 4167-4173, 2018.  
DOI: 10.1021/acs.cgd.8b00673
26. Lopes Jesus, A. J., Nunes, C. M., Fausto, R., Reva, I., *Conformational Control over an Aldehyde Fragment by Selective Vibrational Excitation of Interchangeable Remote Antennas*, *Chem. Comm.*, 54, pp 4778-4781, 2018.  
DOI: 10.1039/C8CC01052H
27. Ogruc-Ildiz, G., Konarska, J., Fausto, R., *Structural Transformations of 3-Fluoro and 3-Fluoro-4-Methoxy Benzaldehydes under Cryogenic Conditions: A Computational and Low Temperature Infrared Spectroscopy Investigation*, *Chem. Phys.*, 508, pp 7-19, 2018.  
DOI: 10.1016/j.chemphys.2018.04.011

28. Lopes, S., Fausto, R., Khriachtchev, L., *Formic Acid Dimers in a Nitrogen Matrix*, *J. Chem. Phys.*, 148, Art. 034301, 2018.

DOI: 10.1063/1.5010417

29. Ivanov, M. S., Khomchenko, V. A., Salimian, M., Nikitin, T., Kopyl, S., Buryakov, A. M., Mishina, E. D., Salehli, F., Marques, P. A. A. P., Goncalves, G., Fausto, R., Paixão, J. A., Kholkin, A. L., *Self-Assembled Diphenylalanine Peptide Microtubes Covered by Reduced Graphene Oxide/Spiky Nickel Nanocomposite: An Integrated Nanobiomaterial for Multifunctional Applications*, *Materials & Design.*, 142, pp 149-157, 2018.

DOI: 10.1016/j.matdes.2018.01.018

30. Apóstolo, R. F. G., Bazsó, G., Ogruc-Ildiz, G., Tarczay, G., Fausto, R., *Near-Infrared In Situ Generation of the Higher-Energy Trans Conformer of Tribromoacetic Acid: Observation of a Large-Scale Matrix-Site Changing Mediated by Conformational Conversion*, *J. Chem. Phys.*, 148, Art. 044303, 2018.

DOI: 10.1063/1.5010288

31. Cabral, L. I. L., Brás, E. M., Henriques, M. S. C., Marques, C., Frija, L., Barreira, L., Paixão, J. A., Fausto, R., Cristiano, M. L. S., *Synthesis, Structure and Cytotoxicity of a Novel Sulphonyl-Bridged Thiadiazolyl-Saccharinate Conjugate. The Relevance of S...N Interaction*, *Chem. Eur. J.*, 24, pp 3251-3262, 2018.

DOI: 10.1002/chem.201705319

32. Brás, E. M., Fausto, R., *Controlled Light-driven Switching in 2-Thiobenzimidazole*, *J. Photochem. Photobiol. A: Chemistry*, 357, pp 185-192, 2018.

DOI: 10.1016/j.jphotochem.2018.02.035

33. Husain, A., Kumar, G., Sood, T., Walia, S., Justino, L. L. G., *Synthesis, Structural Characterization and DFT Analysis of an Unusual Tryptophan Copper(II) Complex Bound via Carboxylate Monodentate Coordination: Tetraaquabis(L-tryptophan) Copper(II) Picrate*, *Inorg. Chim. Acta*, 482, pp 324-332, 2018.

DOI: 10.1016/j.ica.2018.06.021

34. Brás, E. M., Fausto, R., *An Insight into Methimazole Tautomerism: Structural Characterization, Photochemistry and Effect of Benzo Substitution*, *J. Mol. Struct.*, 1172, pp 42-54, 2018.

DOI: 10.1016/j.molstruc.2018.02.013

35. Évora, A. O. L., Castro, R. A. E., Maria, T. M. R., Ramos Silva, M., 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

36. Holanda, B. B. C., Alarcon, R. T., Guerra, R. B., Rinaldo, D., Spazzini, F.C.R., Castro, R. A. E., Bannach, G., *Investigation of thermal degradation products of mebendazole by thermal and spectroscopic analysis*, *J. Anal. Appl. Pyrolysis*, 135, pp 76-81, 2018.

DOI: 10.1016/j.jaap.2018.09.017



37. Holanda, B. B. C., Alarcon, R. T., Gaglieri, C., Souza, A. R., 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.*, 2018.

DOI: 10.1007/s10973-018-7873-8

38. Ito, V. C., Schnitzler, E., Demiate, I. M., Eusébio, M. E. S., Lacerda, L. G., Castro, R. A. E., *Physicochemical, Thermal, Crystallographic, and Morphological Properties of Biodynamic Black Rice Starch, and of Residual Fractions From Aqueous Extraction*, *Starch - Stärke*, 70, pp 17003482018, 2018.

DOI: 10.1002/star.201700348

39. Martin-Ramos, P., Maria, T. M. R., Correa-Guimaraes, A., Carrion-Prieto, P., Hernandez-Navarro, S., Martin-Gil, J., *Crude and refined oils from *Elaeis guineensis*: Facile characterization by FTIR and thermal analysis techniques*, *Int. J. Food Prop.*, 20, S2739-S2749, 2018.

DOI: 10.1080/10942912.2017.1372470

40. Kumar, S., Wani, M. Y., Arranja, C. T., Castro, R. A. E., Paixão, J. A., Sobral, A. J. F. N., *Synthesis, physicochemical and optical properties of bis-thiosemicarbazone functionalized graphene oxide*, *Spectrochim. Acta*, 188, pp 183-188, 2018.

DOI: 10.1016/j.saa.2017.06.045

41. Pereira, M. M., Dias, L. D., Calvete, M. J. F., *Metalloporphyrins: Bioinspired Oxidation Catalysts*, *ACS Catalysis*, 8, pp 10784-10808, 2018.

DOI: 10.1021/acscatal.8b01871

42. Guillen, M. G., Gámez, F., Roales, J., Lopes-Costa, T., Pinto, S. M. A., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., Pedrosa, J. M., *Molecular-based selection of porphyrins towards the sensing of explosives in the gas phase*, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 260, pp 116-124, 2018.

DOI: 10.1016/j.snb.2017.12.163.

43. Tomé, V. A., Calvete, M. J. F., Vinagreiro, C. S., Aroso, R. T., Pereira M. M., *A New Tool in the Quest for Biocompatible Phthalocyanines: Palladium Catalyzed Aminocarbonylation for Amide Substituted Phthalonitriles and Illustrative Phthalocyanines Thereof*, *Catalysts*, 8, pp 480, 2018.

DOI: 10.3390/catal8100480

44. Calvete, M. J. F., Dini, D., *Conjugated Macrocyclic Materials with Photoactivated Optical Absorption for the Control of Energy Transmission Delivered by Pulsed Radiations*, *Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews*, 35, pp 56–73, 2018.

DOI: 10.1016/j.jphotochemrev.2018.02.001

45. Rodrigues, F. M. S., Kucmierczyk, P. K., Pineiro, M., Jackstell, R., Franke, R., Pereira, M. M., Beller, M., *Dual Rh-Ru catalysts for reductive hydroformylations of olefins to alcohols*, *ChemSusChem*, 11, pp 2310-2314, 2018.

DOI:10.1002/cssc.201800488

46. Damas, L., Carrilho, R. M. B., Nunes, S. C. C., Pais, A. A. C. C., Kollár L., Pineiro, M., Pereira, M. M., *A novel Pd-catalysed sequential carbonylation/cyclization approach toward bis-N-heterocycles: rationalization by electronic structure calculations*, *Royal Society Open Science*, 5, pp 181140, 2018.

DOI: 10.1098/rsos.181140

47. Dias, L. D., Carrilho, R. M. B., Henriques, C. A., Piccirilo, G., Fernandes, A., Rossi, L. M., Ribeiro, M. F., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., *A recyclable hybrid manganese(III) porphyrin magnetic catalyst for selective olefin epoxidation using molecular oxygen.*, *Journal of Porphyrins and Phthalocyanines*, 22, pp 1-11, 2018.

DOI: 10.1142/S108842461850027X

48. Dias, L. D., Carrilho, R. M., Henriques, C. A., Calvete, M. J. F., Masdeu-Bultó, A. M., Claver, C., Rossi, L. M., Pereira, M. M., *Hybrid-Metalloporphyrin Magnetic Nanoparticles as Catalysts for Sequential Transformation of Alkenes and CO<sub>2</sub> into Cyclic Carbonates*, *ChemCatChem*, 10, pp 2792-2803, 2018.

DOI: 10.1002/cctc.201800397

49. Dias, L. D., Gonçalves, K. H. E., Queiroz, J. E., Vila Verde, G. M., Aquino, G. L. B., *An eco-friendly and alternative method of forced degradation of fluoroquinolone drugs by microwave irradiation: a new application for analytical eco-scale*, *Journal of Microwave Power and Electromagnetic Energy*, 1, pp 1-20, 2018.

DOI: 10.1080/08327823.2018.1494470

50. Custodio, J. M. F., Guimarães-Neto, J. J. A., Awad, R., Queiroz, J. E., Vila Verde, G. M., Mottin, M., Neves, B. J., Andrade, C. H., Aquino, G. L. B., Valverde, C., Osório, F. A. P., Baseia, B., Napolitano, H. B., *Molecular Modeling and Optical Properties of a Novel Fluorinated Chalcone*, *Arabian Journal of Chemistry*, 2018. (in press)

DOI: 10.1016/j.arabjc.2018.11.010

51. Custodio, J. M. F., Ternavisk, R. R., Ferreira, C. J. S., Figueiredo, A. S., Aquino, G. L. B., Napolitano, H. B., Valverde, C., Baseia, B., *Using the Supermolecule Approach to Predict the Nonlinear Optics Potential of a Novel Asymmetric Azine*, *Journal of Physical Chemistry A*, 123, pp 153-162, 2018.

DOI: 10.1021/acs.jpca.8b07872

52. Cova, T. F., Murtinho, D., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M., *Combining Cellulose and Cyclodextrins: Fascinating Designs for Materials and Pharmaceuticals*, *Frontiers in Chemistry*, 6, pp 271, 2018.

DOI: 10.3389/fchem.2018.00271

53. Tavares, N. C. T., Neves, C. T., Milne, B. F., Murtinho, D., Pais, A. A. C. C., Serra, M. E. S., *Chiral thiazolidines in the enantioselective ethylation of aldehydes: An experimental and computational study*, *J. Organometallic Chemistry*, 878, pp 1-10, 2018.

DOI: 10.1016/j.jorganchem.2018.09.027

54. Miguel, G. C., Abrantes, A. M., Laranjo, M., Grizotto, A. Y. K., Camporeze, B., Pereira, J. A., Brites, G., Serra, A. C., Pineiro, M., Rocha-Gonsalves, A., Botelho, M. F., Priolli, D. G., *A new therapeutic proposal for inoperable osteosarcoma: Photodynamic therapy, Photodiagnosis and Photodynamic Therapy*, 21, pp 79–85, 2018.

DOI: 10.1016/j.pdpdt.2017.11.009

55. Costa, A. L., Gomes, A. C., Pereira, R. C., Pillinger, M., Gonçalves, I. S., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *Interactions and Supramolecular Organization of Sulfonated Indigo and Thioindigo Dyes in Layered Hydroxide Hosts, Langmuir*, 34, pp 453–464, 2018.

DOI: 10.1021/acs.langmuir.7b03735.

56. Pereira, N. A. M., Laranjo, M., Pina, J., Oliveira, A. S. R., Ferreira, J. D., Sanchez-Sanchez, C., Casalta-Lopes, J., Gonçalves, A. C., Sarmiento-Ribeiro, A. B., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Advances on Photodynamic Therapy of Melanoma through Novel Ring-Fused 5,15-Diphenylchlorins, Eur. J. Med. Chem*, 146, pp 395-408, 2018.

DOI: 10.1016/j.ejmech.2017.12.093

57. Vila Verde, G. M., Barros, D. A., Oliveira, M. S., Aquino, G. L. B., Realino de Paula, J., Santos, D. M., Dias, L. D., Pineiro, M., Pereira, M. M., *A Green Protocol for Microwave-assisted Extraction of Volatile Oil Terpenes from Pterodon emarginatus Vogel. (Fabaceae), Molecules*, 23, pp 651-663, 2018.

DOI: 10.3390/molecules23030651

58. Matsushita, A. F. Y., Filho, C. M. C., Pineiro, M., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M., *Effect of Eu(III) and Tb(III) chloride on the gelification behavior of poly (sodium acrylate), J. Mol. Liquids*, 264, pp 205–214, 2018.

DOI: 10.1016/j.molliq.2018.05.040

59. Calvete, M. J. F., Pineiro, M., Dias, L. D., Pereira, M. M., *Hydrogen Peroxide and Metalloporphyrins in Oxidation Catalysis: Old Dogs with Some New Tricks, ChemCatChem*, 10 17, pp 3615-3635, 2018.

DOI: 10.1002/cctc.201800587

60. Lopes, S. M. M., Novaes, J. S., Costa, D. C. S., Castro, H. C., Figueiredo, A. M. S., Ferreira, V. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., Silva, F. C., *Hetero-Diels-Alder Reactions of Novel 3-Triazolyl-Nitrosoalkenes as an Approach to Functionalized 1,2,3-Triazoles with Antibacterial Profile, Eur. J. Med. Chem.*, 143, pp 1010-1020, 2018.

DOI: 10.1016/j.ejmech.2017.11.052

61. Lopes, S. M. M., Gomes, C. S. B., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Reactivity of Steroidal 1-Azadienes Toward Carbonyl Compounds under Enamine Catalysis: Chiral Penta- and Hexacyclic Steroids, Org. Lett.*, 20, pp 4332-4336, 2018.

DOI: 10.1021/acs.orglett.8b01783

62. Lopes, S. M. M., Cardoso, A. L., Lemos, A., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Recent Advances on the Chemistry of Conjugated Nitrosoalkenes and Azoalkenes, Chemical Reviews*, 118, pp 11324-11352, 2018.

DOI: 10.1021/acs.chemrev.8b00375

63. 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, pp 148-152, 2019.  
DOI: 10.1021/acs.jchemed.7b00933
64. Lamsaf, H., Soares, M. I. L., Pinto, S. M. V., Brás, E. M., Henriques, M. S. C., Paixão, J. A., Oulmekki, A., Fausto, R., *Molecular and Crystal Structures and Spectroscopic Properties of 2-Oxo-2-(Thiophen-2-yl) Ethyl Phosphonic Acid*, *J. Mol. Struct.*, 1178, pp 73-82, 2019.  
DOI: 10.1016/j.molstruc.2018.10.015
65. Martins, N., Pereira, J. L., Antunes, F. E., Melro, E., et al, *Role of surfactant headgroups on the toxicity of SLEnS-LAS mixed micelles: A case study using microtox test*, *Science of the total environment*, 643, pp 1366-1372, 2018.  
DOI: 10.1016/j.scitotenv.2018.06.293
66. Milcovich, G., Antunes, F. E., Grassi, M., Asaro, F., *Stabilization of unilamellar cationic vesicles induced by  $\beta$ -cyclodextrins: A strategy for a tunable drug delivery depot*, *International journal of pharmaceutics*, 548, pp 474-479, 2018.  
DOI: 10.1016/j.ijpharm.2018.07.026
67. Melro, E., Alves, L., Antunes, F., Medronho, B., *A brief overview on lignin dissolution*, *Journal of Molecular Liquids*, 265, pp 578-584, 2018.  
DOI: 10.1016/j.molliq.2018.06.021
68. Alves, L., Lindman, B., Klotz, B., Böttcher, A., Haake, H. M., Antunes, F. E., *On the rheology of mixed systems of hydrophobically modified polyacrylate microgels and surfactants: Role of the surfactant architecture*, *Journal of colloid and interface science*, 513, pp 489-496, 2018.  
DOI: 10.1016/j.jcis.2017.11.047
69. Pereira, J. C., Jarak, I., Carvalho, R. A., *Fractal Approach for  $^1\text{H-NMR}$  Spectra Simplification and Data Processing*, *Applied Magnetic Resonance*, 49, pp 975-998, 2018.  
DOI: 10.1007/s00723-018-1010-5
70. Pereira, J. C., Pais, A. A. C. C., Burrows, H. D., *Analysis of raw EEM fluorescence spectra - ICA and PARAFAC capabilities*, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 205, pp 320-334, 2018.  
DOI: 10.1016/j.saa.2018.07.025
71. Pereira, J. C., Marques, J. M. C.; Włodarczyk, E., Fenert, B.; Zarzycki, P. K., *Toward the Understanding of Micro-TLC Behavior of Various Dyes on Silica and Cellulose Stationary Phases Using A Data Mining Approach*, *Journal of AOAC International*, 101, pp 1437-1447, 2018.  
DOI: 10.5740/jaoacint.18-0061
72. Jesus, S., Fragal, E. H., Rubira, A. F., Muniz, E. C., Valente, A. J. M., Borges, O., *The inclusion of chitosan in poly- $\epsilon$ -caprolactone nanoparticles: Impact on the delivery system characteristics and on the adsorbed ovalbumin secondary structure*, *AAPS PharmSciTech*, 19, pp 101-113, 2018.  
DOI: 10.1208/s12249-017-0822-1

73. Singh, P., Medronho, B., Valente, A. J. M., Miguel, M. G., Lindman, B., *Exploring the prebiotic effect of cyclodextrins on probiotic bacteria entrapped in carboxymethyl cellulose-chitosan particles*, *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, 168, pp 156-162, 2018.

DOI: 10.1016/j.colsurfb.2017.12.014

74. Pereira, R. P., Nunes, S. C., Toquer, G., Cardoso, M., Valente, A. J. M., Silva, M. M., Carlos, L. A. D., Ferreira, R. A. S., Bermudez, V. Z., *Novel highly luminescent amine-functionalized bridged silsesquioxanes*, *Frontiers in Chemistry*, 5, Article 131, 2018.

DOI: 10.3389/fchem.2017.00131

75. Martelo, L. M., Fonseca, S. M., Marques, A. T., Burrows, H. D., Valente, A. J. M., Justino, L. L. G., Scherf, U., Pradhan, S., Song, Q., *Effects of Charge Density on Photophysics and Aggregation Behaviour of Anionic Fluorene-arylene Conjugated Polyelectrolytes*, *Polymers*, 10, 258, 2018.

DOI: 10.3390/polym10030258

76. Filho, C. M. C., Bueno, P. V. A., Matsushita, A. F. Y., Rubira, A. F., Muniz, E. C., Durães, L., Murtinho, D. M. B., Valente, A. J. M., *Synthesis, characterization and sorption studies of aromatic compounds by hydrogels of chitosan blended with  $\beta$ -cyclodextrin- and PVA functionalized pectin*, *RSC Advances*, 8, pp 14609-14622, 2018.

DOI: 10.1039/c8ra02332h

77. Matsushita, A. F. Y., Filho, C. M. C., Pineiro, M., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M., *Effect of Eu(III) and Tb(III) chloride on the gelification behavior of poly(sodium acrylate)*, *Journal of Molecular Liquids*, 264, pp 205-214, 2018.

DOI: 10.1016/j.molliq.2018.05.040

78. Cova, T. F. G. G., Murtinho, D., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M., *Combining cellulose and cyclodextrins: fascinating designs for materials and pharmaceuticals*, *Frontiers in Chemistry - Polymer Chemistry*, 6, 271, 2018.

DOI: 10.3389/fchem.2018.00271

79. Costa, D., Valente, A. J. M., Queiroz, J. A., Sousa, A., *Finding the ideal polyethylenimine-plasmid DNA system for co-delivery of payloads in cancer therapy*, *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, 270, pp 627-636, 2018.

DOI: 10.1016/j.colsurfb.2018.06.063

80. Cova, T. F. G. G., Murtinho, D., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M., *Cyclodextrin-based Materials for Removing Micropollutants From Wastewater*, *Current Organic Chemistry*, 22, pp 2146-2177, 2018.

DOI: 10.2174/1385272822666181019125315

81. Mentel, K. K., Serra, A., Abreu, P. E., Arnaut, L. G., *Higher activation barriers can lift exothermic rate restrictions in electron transfer and enable faster reactions*, *Nature Communications*, 9, 2903, 2018.

DOI: 10.1038/s41467-018-05267-5

82. Prudente, F. V., Marques, J. M. C., Pereira, F. B., *Correction: Solvation of Li<sup>+</sup> by argon: how important are three-body forces?*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 20, pp 16877-16882, 2018.  
DOI: 10.1039/C8CP91778G
83. Rodrigues, S. G., Pais, A. A. C. C., Marques, J. M. C., *Two-dimensional clusters from self-assembly of oppositely charged particles*, *Chem. Phys. Lett.*, 706, pp 586-593, 2018.  
DOI: 10.1016/j.cplett.2018.07.003
84. Basso, J., Miranda, A., Nunes, S., Cova, T. F. G. G., Sousa, J., Vitorino, C., Pais, A. A. C. C., *Hydrogel-Based Drug Delivery Nanosystems for the Treatment of Brain Tumors*. *Gels* 4, 62, 2018.  
DOI: 10.3390/gels4030062
85. Silva, J., Mendes, M., Cova, T., Sousa, J., Pais, A., Vitorino, C., *Unstructured Formulation Data Analysis for the Optimization of Lipid Nanoparticle Drug Delivery Vehicles*. *AAPS PharmSciTech*, 19, pp 2383–2394, 2018.  
DOI: 10.1208/s12249-018-1078-0
86. Cova, T. F. G. G., Milne, B. F., Nunes, S. C. C., Pais, A. A. C. C., *Drastic Stabilization of Junction Nodes in Supramolecular Structures Based on Host–Guest Complexes*, *Macromolecules*, 51, pp 2732-2741, 2018.  
DOI: 10.1021/acs.macromol.8b00154
87. Encarnação, T., Arranja, C. T., Cova, T. F. G. G., Pais, A. A. C. C., Campos, M. G., Sobral, A. J. F. N., Burrows, H. D., *Monitoring oil production for biobased feedstock in the microalga *Nannochloropsis* sp.: a novel method combining the BODIPY BD-C12 fluorescent probe and simple image processing*. *Journal of Applied Phycology*, 30, pp 2273-2285, 2018.  
DOI: 10.1007/s10811-018-1437-y
88. Mendes, M., Miranda, A., Cova, T., Gonçalves, L., Almeida, A. J., Sousa, J. J., do Vale, M. L.C., Marques, E. F., Pais, A., Vitorino, C., *Modeling of ultra-small lipid nanoparticle surface charge for targeting glioblastoma*. *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, 117, pp255-269, 2018.  
DOI: 10.1016/j.ejps.2018.02.024
89. Miranda, A., Cova, T. F. G. G., Sousa, J. J., Vitorino, C. S., Pais, A. A. C. C., *Computational modeling in glioblastoma: from the prediction of blood–brain barrier permeability to the simulation of tumor behavior*. *Future Medicinal Chemistry*, 10(1):121-131, 2018.  
DOI: 10.4155/fmc-2017-0128
90. Nunes, S. C. C., Cova, T. F. G. G., Dias, R. S., Pais, A. A. C. C., *Adsorption of charged macromolecules upon multicomponent responsive surfaces*. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 20, pp 19811-19818, 2018.  
DOI: 10.1039/c8cp03383h
91. Basso, J., Mendes, M., Cova, T. F. G. G., Sousa, J., Pais, A. A. C. C., Vitorino, C. S., *Analytical Quality by Design (AQbD) as a multiaddressable platform for co-encapsulating drug assays*. *Analytical Methods*, 47, pp 5659-5671, 2018.  
DOI: 10.1039/c8ay01695j

92. Alagia, A., Jorge, A. F., Aviñó, A., Cova, T. F. G. G., Crehuet, R., Grijalvo, S., Pais, A. A. C. C., Eritja, R., *Exploring PAZ/3'-overhang interaction to improve siRNA specificity. A combined experimental and modeling study*, *Chemical Science*, 8, pp 2074-2086, 2018.

DOI: 10.1039/c8sc00010g

93. Jorge, A. F., Eritja, R., *Overview of DNA Self-Assembling: Progresses in Biomedical Applications*, *Pharmaceutics*, 10, 268, 2018.

DOI: 10.3390/pharmaceutics10040268

94. Jorge, A. F., Aviñó, A., Pais, A. A. C. C., Eritja, R., Fàbrega, C., *DNA-based nanoscaffolds as vehicles for 5-fluoro-2'-deoxyuridine oligonucleotides in colorectal cancer therapy*, *Nanoscale*, 10, pp 7238-7249, 2018.

DOI: 10.1039/C7NR08442K

95. Grijalvo, S., Alagia, A., Jorge, A. F., Eritja, R., *Covalent strategies for targeting messenger and non-coding RNAs. An updated review on siRNA, miRNA and antimir conjugates*, *Genes*, 9, 74, 2018.

DOI: 10.3390/genes9020074.

96. Basso, J., Miranda, A., Sousa, J. J., Pais, A. A. C. C., Vitorino, V., *Repurposing drugs for glioblastoma: From bench to bedside*, *Cancer Letters*, 428, pp 173-183, 2018.

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.canlet.2018.04.039>

97. Soares, S., Sousa, J. J., Pais, A. A. C. C., Vitorino, V., *Nanomedicine: Principles, Properties, and Regulatory Issues*, *Frontiers in Chemistry*, 6, 360, 2018.

DOI:10.3389/fchem.2018.00360

98. Mendes, M., Sousa, J. J., Pais, A. A. C. C., Vitorino, V., *Targeted theranostic nanoparticles for brain tumor treatment*, *Pharmaceutics*, 10, 181, 2018.

DOI: 10.3390/pharmaceutics10040181

99. Kumar, S., Wani, M. Y., Koh, J., Sobral, A. J. F. N., *Carbon dioxide adsorption and cycloaddition reaction of epoxides using chitosan-graphene oxide nanocomposite as a catalyst*, *J Environ. Sci.*, 69, pp 77-84, (2018).

DOI: 10.1016/j.jes.2017.04.013

100. Krishnakumar, B., Kumar, S., Gil, J. M., Pandiyan, V., Aguiar, A., Sobral, A. J. F. N., *Highly active P25@Pd/C nanocomposite for the degradation of Naphthol Blue Black with visible light*, *J. Mol. Struct.*, 1135, pp 346-352, 2018.

DOI: 10.1016/j.saa.2017.06.045

101. Catarino, M. D., Silva, A. M. S., Saraiva, S., Sobral, A. J. F. N., Cardoso, S. M., *Characterization of phenolic constituents and evaluation of antioxidant properties of leaves and stems of *Eriocephalus africanus**, *Arab. J. Chem.*, 11, pp 62-69, 2018.

DOI: 10.1016/j.arabjc.2015.04.018

102. Pereira da Silva, P. S., Martin-Ramos, P., Domingos, S. R., Bota de Sousa, M. C., Arranja, C. T., Sobral, A. J. F. N., Silva, M. R., *On the Performance of Hybrid Functionals for Non-linear Optical Properties and Electronic Excitations in Chiral Molecular Crystals: The Case of Butterfly-Shaped Dicinnamalacetone*, Chem. Phys. Chem., 19, pp 82-92, 2018.

DOI: 10.1002/cphc.201700975

103. Senthilraja, A., Krishnakumar, B., Hariharan, R., Sobral, A. J. F. N., Surya, C., Arul John, N. A., Shanthi, M., *Synthesis and characterization of bimetallic nanocomposite and its photocatalytic, antifungal and antibacterial activity*, Sep. Purif. Technol., 202, pp 373-384, 2018.

DOI: 10.1016/j.seppur.2018.04.015

104. Rajasri, S., Balachandran, S., Krishnakumar, B., Sobral, A. J. F. N., Swaminathan, M., Thirunarayanan, G., Pasupathy, N., Muthuvel, I., *Solar Light Driven Zn<sub>3</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>/ZnO Heterostructure: Enhanced Photocatalytic Mineralization of Basic Violet 10*, Int J Curr Adv. Res., 7, pp 11297-11301 2018.

DOI: 10.24327/ijcar.2018. 11301.1952

105. Krishnakumar, B., Hariharan, R., Pandiyan, V., Aguiar, A., Sobral, A. J. F. N., *Gelatin-assisted g-TiO<sub>2</sub>/BiOI heterostructure nanocomposites for azo dye degradation under visible light*, J. Environ. Chem. Eng., 6, pp 4282-4288, 2018.

DOI: 10.1016/j.jece.2018.06.035

106. Kumar, S., Prasad, K., Gil, J. M., Sobral, A. J. F. N., Joonseok Koh, *Mesoporous zeolite-chitosan composite for enhanced capture and catalytic activity in chemical fixation of CO<sub>2</sub>*, Carbohydr. Polym., 198, pp 401-406, 2018.

DOI: 10.1016/j.carbpol.2018.06.100

107. Kumar, S., Yadav, R. K., Ram, K., Aguiar, A., Koh, J., Sobral, A. J. F. N., *Graphene oxide modified cobalt metallated porphyrin photocatalyst for conversion of formic acid from carbon dioxide*, J. CO<sub>2</sub> Util., 27, pp 107-114, 2018.

DOI: 10.1016/j.jcou.2018.07.008

108. Balakrishna, A., Aguiar, A., Sobral, P. J. M., Wani, M. Y., Almeida e Silva, J., Sobral, A. J. F. N., *Paal-knorr synthesis of pyrroles: From conventional to green synthesis*, Cat. Rev., 61, pp 84-110, 2018.

DOI: 10.1080/01614940.2018.1529932

109. Romeiro, A., Azenha, M. E, Canle, M., Rodrigues, V. H. N., Da Silva, J. P., Burrows, H. D., *Titanium Dioxide Nanoparticle Photocatalysed Degradation of Ibuprofen and Naproxen in Water: Competing Hydroxyl Radical Attack and Oxidative Decarboxylation by Semiconductor Holes*, ChemistrySelect, 3, pp 10915-10924, 2018.

DOI: 10.1002/slct.201801953

110. Fernandes, S. S. M., Belsley, M., Pereira, A. I., Ivanou, D., Mendes, A., Justino, L. L. G., Burrows, H D., Raposo, M. M. M., *Push-Pull N,N-Diphenylhydrazones Bearing Bithiophene or Thienothiophene Spacers as Nonlinear Optical Second Harmonic Generators and as*



*Photosensitizers for Nanocrystalline TiO<sub>2</sub> Dye-Sensitized Solar Cells*, *ACS Omega*, 3, pp 12893-12904, 2018.

DOI: 10.1021/acsomega.8b01045

111. Pinto, M., I., Salgado, R., Laia, C. A. T., Cooper, W. J., Sontag, G., Burrows, H. D., Branco, L. Vale, C., Noronha, J. P., *The effect of chloride ions and organic matter on the photodegradation of acetamiprid in saline waters*. *J. Photochem. Photobiol. A-Chemistry*, 360, pp 117-124, 2018.

DOI: 10.1016/j.jphotochem.2018.04.020

112. Verissimo, L. M. P., Ramos, M. L., Justino, L. L. G., Burrows, H. D., Cruz, P. F., Cabral, A. M. T. D. P., Veiga, F. J. B., Estes, M. A., Ribeiro, A. C. F., *The structure and diffusion behaviour of the 1:1 copper(II) complex of ethambutol in aqueous solution*, *J. Mol. Liq.*, 262, pp 63-70, 2018.

DOI: 10.1016/j.molliq.2018.04.039

113. Negri G., Barreto, L. M. R. C., Sper, F. L., de Carvalho, C., Campos, M. G., *Phytochemical analysis and botanical origin of Apis mellifera bee pollen from the municipality of Canavieiras, Bahia State, Braz. J. Food. Technol.*, 21, pp 1-16. e2016176. 2018.

DOI:10.1590/1981-6723.17616

114. Costa, M. L., Rodrigues, J. A., Azevedo, J., Vasconcelos, V., Eiras, E., Campos, M. G., *Hepatotoxicity induced by paclitaxel interaction with turmeric in association with a microcystin from a contaminated dietary supplement*. *Toxicon*, 150, pp 207–211, 2018.

DOI: 10.1016/j.toxicon.2018.05.022

115. Urcan, A. C., Criste, A. D., Dezmiorean, D. S., Mărgăoan, R., Caeiro, A., Campos, M. G., *Similarity of Data from Bee Bread with the Same Taxa Collected in India and Romania*. *Molecules* 23, pp 2491-2510, 2018.

DOI:10.3390/molecules23102491

116. Delgado, T., Paula, V. B., Campos, M. G., Farinha, N., Caeiro, A., Estevinho, L. M., Anjos, O., *Screening of Biological Activities of Ligustrum lucidum Aiton Berries: a Comparative Approach*. *Natural Product. Communications*, 13, pp 1685-1690, 2018.

117. Perpétuo, N. C., Campos, M. G., Trincão, P. R., Coutinho, A. P., *As plantas tóxicas das escolas, jardins e parques de Coimbra*. *Bol. R. Soc. Esp. Hist. Nat.*, 112, pp 35-45, 2018.

ISSN: 2659-2703

118. Ribeiro, A. C. F., Estes, M. A., *Transport Properties for Pharmaceutical Controlled-Release Systems: A Brief Review of the Importance of Their Study in Biological Systems*. *This Special Issue in Transport Properties for Pharmaceutical Controlled-Release Systems*, *Biomolecules*, 8, pp 178-188, 2018.

DOI:10.3390/biom8040178

119. Barros, M. C. F., Verissimo, L. M. P., Ribeiro, A. C. F., Estes, M. A., *Diffusion in ternary aqueous {L-dopa + (NaSO<sub>3</sub>)n-β-cyclodextrin} solutions using the pseudo-binary approximation*, *J. Chem. Thermodyn.* 123, pp 17–21, 2018.

DOI: 10.1016/j.jct.2018.03.014

120. Pinto, C., Seixas de Melo, J. S., *The Molecules of Colour in Portuguese Postage Stamps (1857-1909)*, *Pure & Appl. Chem.*, 90, 2018.

DOI: 10.1515/pac-2017-0701

121. Pina, J., Eckert, A.; Scherf, U., Galvao, A. M., Seixas de Melo, J. S., *Cyclopentadithiophene derivatives: a step towards an understanding of thiophene copolymer excited state deactivation pathways*, *Mater. Chem. Front.*, 2, pp 149-156, 2018.

DOI: 10.1039/C7QM00440K

122. Pina, J., Alnady, M., Eckert, A., Scherf, U., Seixas de Melo, J. S., *Alternating donor-acceptor indigo-cyclopentadithiophene copolymers: competition between excited state conformational relaxation, energy transfer and excited state proton transfer*. *Mater. Chem. Front.*, 2, pp 281-290, 2018.

DOI: 10.1039/C7QM00439G

123. Pereira, N. A. M., Laranjo, M., Pina, J., Oliveira, A. S. R., Ferreira, J. D., Sánchez-Sánchez, C., Casalta-Lopes, J., Gonçalves, A. C., Sarmiento-Ribeiro, A. B., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Advances on photodynamic therapy of melanoma through novel ring-fused 5,15-diphenylchlorins*. *Eur. J. Med. Chem.*, 146, pp 395-408, 2018.

DOI: 10.1016/j.ejmech.2017.12.093

124. Pereira, R. C., Pineiro, M., Galvão, A. M., Seixas de Melo, J. S., *Thioindigo, and sulfonated thioindigo derivatives as solvent polarity dependent fluorescent on-off systems*, *Dyes and Pigments*, 158, pp 259-266, 2018.

DOI: 10.1016/j.dyepig.2018.05.049

125. Aguiló, E., Moro, A. J., Outis, M., Pina, J., Sarmiento, D., Seixas de Melo, J. S., Rodríguez, L., Lima, J. C., *Deactivation Routes in Gold(I) Polypyridyl Complexes: Internal Conversion Vs Fast Intersystem Crossing*. *Inorg. Chem.*, 57, pp 13423–13430, 2018.

DOI: 10.1021/acs.inorgchem.8b01993.

126. Rodrigues, A. C. B., Pina, J., Dong, W., Forster, M., Scherf, U., Seixas de Melo, J. S., *Aggregation-Induced Emission in Phenothiazine–TPE and –TPAN Polymers*. *Macromolecules*, 51, pp 8501–8512, 2018.

DOI: 10.1021/acs.macromol.8b01758

127. Carvalho, M. J., Laranjo, M., Abrantes, A. M., Casalta-Lopes, J., Sarmiento-Santos, D., Costa, T., Serambeque, B., Almeida, N., Gonçalves, T., Mamede, C., Encarnação, J., Oliveira, R., Paiva, A., de Carvalho, R., Botelho, F., Oliveira, C., *Endometrial Cancer Spheres Show Cancer Stem Cells Phenotype and Preference for Oxidative Metabolism*, *Pathology & Oncology Research*, pp 1–12, 2018.

DOI: 10.1007/s12253-018-0535-0

128. Varandas, A. J. C., *Straightening the Hierarchical Staircase for Basis Set Extrapolations: A Low-Cost Approach to High-Accuracy Computational Chemistry*, *Annual Review of Physical Chemistry*, 69, pp 177-203, 2018.

DOI: 10.1146/annurev-physchem-050317-021148

129. Varandas, A. J. C., *CBS extrapolation in electronic structure pushed to the end: a revival of minimal and sub-minimal basis sets*, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 20, pp 22084-22098, 2018.

DOI: 10.1039/C8CP02932F

130. Varandas, A. J. C., *Even numbered carbon clusters: cost-effective wavefunction-based method for calculation and automated location of most structural isomers?*, *European Physical Journal D*, 72, 134, 2018.

DOI: 10.1140/epjd/e2018-90145-4

131. Caridade, P. J. S. B., Li, J., Mota, V. C., Varandas, A. J. C., *The O plus NO(v) Vibrational Relaxation Processes Revisited*, *Journal of Physical Chemistry A*, 22, pp 5299-5310, 2018.

DOI: 10.1021/acs.jpca.8b03431

132. Rocha, C. M. R. Varandas, A. J. C., *Energy-switching potential energy surface for ground-state C-3*, *Chemical Physics Letters*, 700, pp 36-43, 2018.

DOI: 10.1016/j.cplett.2018.04.005

133. Goncalves, C. E. M., Galvao, B. R. L., Mota, V. C., Braga, J. P., Varandas, A. J. C., *Accurate Explicit-Correlation-MRCI-Based DMBE Potential-Energy Surface for Ground-State CNO*, *Journal of Physical Chemistry A*, 122, pp 198-4207, 2018.

DOI: 10.1021/acs.jpca.8b01881

134. Rocha, C. M. R., Varandas, A. J. C., *Multiple conical intersections in small linear parameter Jahn-Teller systems: the DMBE potential energy surface of ground-state C-3 revisited*, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 20, pp 10319-10331, 2018.

DOI: 10.1039/C7CP06656B

135. Varandas, A. J. C., Rocha, C. M. R., *C-n(n=2-4): current status*, *Philosophical Transactions of the Royal Society A - Mathematical Physical and Engineering Sciences*, 376, article 20170145, 2018.

DOI: 10.1098/rsta.2017.0145

136. Varandas, A. J. C., Rocha, C. M. R., *3D time-dependent wave-packet approach in hyperspherical coordinates for the H + O-2 reaction on the CHIPR and DMBE IV potential energy surfaces*, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 20, pp 478-488, 2018.

DOI: 10.1039/c7cp06254k

137. Xavier, F. George D., Martinez-Gonzalez, Marco, Varandas, A. J. C., *Accurate ab initio potential for HO2+: CBS extrapolated energies and direct-fit diatomic curves*, *Chemical Physics Letters*, 691, pp 421-430, 2018.

DOI: 10.1016/j.cplett.2017.11.050

138. Peres, I. M., Rodrigues, S. P. J., *From Jane Marcet to the Viscount of Vilarinho de São Romão: conversations about chemistry in the nineteenth century*, *História Ciências Saúde-Manguinhos*, 25, pp 469-495, 2018.

DOI: 10.1590/S0104-59702018000200010

139. Alves, A. A. S., Cruz, P. F., Brito, R. M. M., Feitosa, E., Antunes, F. E., *Development of sugar based biodegradable nanoencapsulators: Understanding the role of alcohol injection method on the preparation of aqueous dispersion of sorbitan ester vesicles*, *Journal of Molecular Liquids*, 277, pp 481-489, 2018.

DOI: 10.1016/j.molliq.2018.12.049

140. Cabral Filho, P.E. Cabrera, M.P., Cardoso, A.L.C., Santana, O.A., Geraldês, C.F.G.C., Santos, B.S., Pedroso de Lima, M. C., Pereira, G. A. L., Fontes, A. *Multimodal highly fluorescent magnetic nanoplatfom to target transferrin receptors in cancer cells*, *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - General Subjects*, 1862, pp 2788-2796, 2018.

DOI: 10.1016/j.bbagen.2018.08.014

141. Cabré, E. J., Martínez-Calle, M., Prieto, M., Fedorov, A., Olmeda, B., Loura, L. M. S. Pérez-Gil, J. *Homo- and hetero-oligomerization of hydrophobic pulmonary surfactant proteins SP-B and SP-C in surfactant phospholipid membranes*. *Journal of Biological Chemistry*, 293, pp 9399-9411, 2018.

DOI: 10.1074/jbc.RA117.000222

142. Coreta-Gomes, F., Vaz, W. L. C., Moreno, M. J., Effect of acyl chain length on the rate of phospholipid flip-flop and intermembrane transfer, *Journal of Membrane Biology* 251, pp 431-442, 2018.

DOI: 10.1007/s00232-017-0009-4

143. 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 – translocation of cholesterol across lipid bilayers*, *Journal of Chemical Theory and Computation*, 14, pp 3840–3848, 2018.

DOI: 10.1021/acs.jctc.8b00150.

144. Matos, P., Figueirinha, A., Paranhos, A., Nunes, F., Cruz, P., Geraldês, C. F. G. C., Cruz, M. T., Batista, M. T., *Bioactivity of *Acanthus mollis* – Contribution of Benzoxazinoids and Phenylpropanoids*, *Journal of Ethnopharmacology*, 227, pp 198-205, 2018.

DOI: /10.1016/j.jep.2018.09.013

145. Morais, C. M., Cardoso, A. M., Cunha, P. P., Aguiar, L., Vale, N., Lage, E., Pinheiro, M., Nunes, C., Gomes, P., Reis, S., Castro, M. M. C. A., Pedroso de Lima, M. C., Jurado, A. S., *Acylation of the S413-PV cell-penetrating peptide as a means of enhancing its capacity to mediate nucleic acid delivery: Relevance of peptide/lipid interactions*, *BBA – Biomembranes*, 1860, pp 2619–2634, 2018.

DOI: 10.1016/j.bbamem.2018.10.002

146. Peters, J. A, Geraldês, C. F. G. C., *A Semi-empirical Method for the Estimation of the Hydration Number of Mn(II)-complexes*, *Inorganics*, 6, 116, 2018.

DOI: 10.3390/inorganics6040116

147. Pinho, S. L. C., Amaral, J. S., Wattiaux, A., Duttine, M., Delville, M.-H., Geraldes, C. F. G. C., *Synthesis and characterization of rare earth orthoferrite  $ReFeO_3$  nanoparticles for biomaging*, *European Journal of Inorganic Chemistry*, pp 3570–3578, 2018.

DOI: 10.1002/ejic.201800468

148. Selvaggio, G., Coelho, P. M. B. M., Salvador, A., *Mapping the phenotypic repertoire of the cytoplasmic 2-Cys peroxiredoxin - thioredoxin system. 1. Understanding commonalities and differences among cell types*, *Redox Biology*, 15, pp 297-315, 2018.

DOI: 10.1016/j.redox.2017.12.008

149. Suturina, E. A., Mason, K., Geraldes, C. F. G. C., Chilton, N. F. Parker, D., Kuprov, I., *Paramagnetic Relaxation Enhancement – Forgotten Anisotropy*, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 20, pp 17676–17686, 2018.

DOI: 10.1039/c8cp01332b

150. Xu, Y. D., Goyanes, A., Geraldes, C. F. G. C., Fogg, A. M., Basit, A. W., Williams, G. R., *Layered gadolinium hydroxides for simultaneous drug delivery and imaging*, *Dalton Transactions*, 47, pp 3166–3177, 2018.

DOI: 10.1039/c7dt03729e

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

1. Rodrigues, S. P. J., *Poções e Paixões – Química e Ópera (recensão de livro)*, *Boletim da Sociedade Portuguesa de Química*, 149, 79-81, 2018.

<https://www.spq.pt/magazines/BSPQuimica/684/article/30002137/pdf>

#### COMUNICAÇÕES APRESENTADAS EM REUNIÕES CIENTÍFICAS

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

1. Jesus, C. S. H., Quintão, R., Soares, H. T., Serpa, C., *Autofluorescence of Protein Aggregates Enable In-Vitro Screening of Anti-Amyloid Drugs*, VI Jornadas Ibéricas de Fotoquímica (6'JIF), Aveiro, Portugal, 2018. **Comunicação Oral.**

2. Prata, A., Henriques, C. A., Calvete, M. J. F., Serpa, C., *Optical Limiting Properties in the femtosecond regime of an Aluminum phthalocyanine and its Iron Oxide Nanoparticle Composite*, 6'JIF, VI Jornadas Ibéricas de Fotoquímica, Aveiro, Portugal, 2018. **Poster.**

3. Silva, A. D., Malva, D., Arnaut, L. G., Serpa, C., *New Generation of Improved Piezophotonic Materials with Innovative Functionalized Carbon Nanotubes*, VI Jornadas Ibéricas de Fotoquímica (6'JIF), Aveiro, Portugal, Setembro 2018. **Poster.**

4. Serpa, C., *Piezophotonics*, VI Jornadas Ibéricas de Fotoquímica (6'JIF), Aveiro, Portugal, 2018. **Comunicação Oral Convidada.**
5. Serpa, C., Sá, G. F. F., Arnaut, L. G., *Development of Piezophotonic Materials: a Trip from the Laboratory Bench to the Market*, Encontro Ciência '18, Encontro com a Ciência e Tecnologia em Portugal, Lisboa, Portugal, 2018. **Comunicação Oral Convidada.**
6. Serpa, C., Sá, G. F. F., Soares, H. T., Arnaut, L. G., *Safe, Fast and Efficient Intraepidermal Delivery Using Laser Piezoporation*, 11th World Meeting on Pharmaceuticals, Biopharmaceutics and Pharmaceutical Technology, Granada, Espanha, 2018. **Poster.**
7. Serpa, C., Sá, G. F. F., Soares, H. T., Arnaut, L. G., *Laser Piezoporation: Safe Interaction with Human Skin and Proof-of-Concept of Intraepidermal Delivery*, XII Spanish-Portuguese Conference on Controlled Drug Delivery, Coimbra, Portugal, 2018. **Poster.**
8. Silva, A. D., Paulino, P. M., Serpa, C., Arnaut, L. G., *Physical Transfection of DNA Encoding Green Fluorescence Protein to Mammalian COS-7 Cells with Photoacoustic Waves*, XII Spanish-Portuguese Conference on Controlled Drug Delivery, Coimbra, Portugal, 2018. **Poster.**
9. Soares, H. T., Costa, G. N., Gonçalves, N. P. F., Monteiro, C. J. P., Abreu, A. R., Rocha, L. B., Schaberle, F. A., Serpa, C., Pereira, M. M., Simões, S., Arnaut, L.G., *Passive and Active Dermal Delivery of a New Photosensitizer for Photodynamic Therapy*, XII Spanish-Portuguese Conference on Controlled Drug Delivery, Coimbra, Portugal, 2018. **Poster.**
10. Arnaut, L. G., *Spectroscopic Determinants in Photodynamic Therapy*, XXXIV European Congress on Molecular Spectroscopy, Coimbra, Agosto 2018. **Lição convidada.**
11. Arnaut, L. G., *Therapeutic Opportunities with Near-Infrared Photosensitizers*, 1<sup>st</sup> Italian-Spanish-Portuguese Joint Meeting in Medicinal Chemistry, Palermo, Itália, Julho 2018. **Lição convidada.**
12. Arnaut, L. G., *Photoinduced Energy and Electron Transfer in Bacterichlorins*, 233<sup>rd</sup> Meeting of the Electrochemical Society, Seattle, EUA, Maio de 2018. **Lição convidada.**
13. Arnaut, L. G., Tão, H., Pereira, M. M., Simões, S., *Fluorescence-Guided Therapy with a New Bacteriochlorin*, 39<sup>th</sup> Meeting of the American Society for Photobiology, Tampa, Florida, EUA, Maio 2018. **Lição convidada.**
14. Arnaut, L. G., *PDT et Cancers 'Têt et Cou'*, XXXVIIe Congrès de la Société Francophone des Laser Médicaux, Arcs, França, Fevereiro 2018. **Lição convidada.**
15. Brás, E. M., Fausto, R., *On the Tautomerism of 2-Mercaptobenzimidazol: A Photoinduced Reaction in Solid Argon*, XXVIII International Conference on Photochemistry (ICP2017), Estrasburgo, França, 2017. **Poster.**
16. Fausto, R., *Matrix Isolation Spectroscopy and Tunneling Control of Chemical Reactions*, Lição proferida na Istanbul (Departamento de Física), Istanbul, Turquia, Setembro 2018. **Lição Plenária.**

17. Fausto, R., Ildiz, G. O., *Matrix Isolation Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications to Short-Living Molecular Species*, Lição proferida no Instituto Nacional de Tecnologia da Índia (Departamento de Química), Kurukshetra, Índia, Janeiro 2018. **Lição Plenária.**
18. Fausto, R., *A Low Temperature Infrared Spectroscopy Investigation of the Intermolecularly Induced Conformational Disorder in Ferrocene Derivatives*, Lição proferida no Instituto Nacional de Tecnologia da Índia (Departamento de Química), Kurukshetra, Índia, Janeiro 2018. **Lição Plenária.**
19. Fausto, R., *Matrix Isolation Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications to Short-Living Molecular Species*, Lição proferida na Faculdade de Química, Universidade Técnica de Lodz, Polónia, Maio 2018. **Lição Plenária.**
20. Fausto, R., *Ferrocene and Ferrocene Derivatives: Combined Structural Studies by Spectroscopy, X-ray diffraction and Thermodynamics Methods*, Lição proferida na Faculdade de Química, Universidade Técnica de Lodz, Polónia, Maio 2018. **Lição Plenária.**
21. Fausto, R., *Photoinduced Reactions in Cryogenic Matrices*, Lição proferida no Departamento de Química da Universidade Rei Fahal Petróleo e Minerais (KFPM University), Arábia Saudita, Novembro 2018. **Lição Plenária.**
22. Issaoui, H., Benali, A., Bejar, M., Dhahri, E., Costa, B. F. O., Kuş, N., Nogueira, B. A., Fausto, R., *Morphological, Structural, Raman and Mossbauer Properties of  $(La_{0.8}Ca_{0.2})_{0.95}Bi_{0.05}FeO_3$  Compound*, 2nd International Conference on Multifunctional Materials and their Applications, Monastir, Marrocos, Outubro 2018. **Poster.**
23. Nunes, C. M., Reva, I., Fausto, R., Kozuch, S., McMahon, R. J., *Spontaneous and Photochemically Induced Reactions of Triplet 2-Formyl-PhenylNitrene in Low-Temperature Matrix*, 24th IUPAC ICPOC, Faro, Portugal, Julho 2018. **Comunicação Oral.**
24. Fausto, R., *A Low Temperature IR Spectroscopy Investigation of the Intermolecularly-Induced Conformational Disorder in Ferrocene Derivatives*, International Conference on Multifunctional Materials: Analytical Techniques and Diverse Applications, Kurukshetra, Índia, Janeiro 2018. **Lição Plenária.**
25. Brás, E. M., Cabral, L. I. L., Henriques, M. S. C., Marques, C., Frija, L. M. T., Barreira, L., Paixão, J. A., Fausto, R., Cristiano, M. L. S., *The Structure and Properties of a Novel Sulphonyl-Bridged Thiadiazolyl-Saccharinate Ligand*, 24th IUPAC ICPOC, Faro, Portugal, Julho 2018. **Poster.**
26. Nunes, C. M., Reva, I., Fausto, R., *Cyclization of Triplet 2-Formyl-PhenylNitrene to 2,1-Benzisoxazole: A New Heavy-Atom Tunneling Event?*, 24th IUPAC ICPOC, Faro, Portugal, Julho 2018. **Poster.**
27. Horta, P., Brás, E. M., Fausto, R., Cristiano, M. L. S., *Synthesis and Structure of a Novel O-Linked Diazirine-Quinolone Conjugate*, 24th IUPAC ICPOC, Faro, Portugal, Julho 2018. **Poster.**

28. Ogruc-Ildiz, G., Fausto, R., *H-Bond Interactions in Solid State in Cytosine and 1-Methylhydantoin*, International Meeting on Anharmonicity in Medium-Sized Molecules and Clusters (AMOC 2018), Budapeste, Hungria, Abril 2018. **Poster.**
29. Fausto, R., *Shining Light on Radical and Nitrene Intermediates: A Matrix Isolation Approach*, 3rd General Meeting of the COST action MOLIM, Budapeste, Hungria, Abril 2018. **Lição Plenária.**
30. Ogruc-Ildiz, G., Fausto, R., *Structural Transformations of 3-Fluoro and 3-Fluoro-4-methoxy Benzaldehydes under Cryogenic Conditions*, 3rd General Meeting of the COST action MOLIM, Budapeste, Hungria, Abril 2018. **Poster.**
31. Ismael, A., Abe, M., Fausto, R., Cristiano, M. L. S., *Insights into the Photochemistry of 5-Aminotetrazole Derivatives; Effect of the Saccharyl Moiety on the Photostability*, 24th IUPAC ICPOC, Faro, Portugal, Julho 2018. **Poster.**
32. Nunes, C. M., Reva, I., Fausto, R., Eckhardt, A. K., Schreiner, P. R., *Competitive Tunneling*, International Symposium on Reactive Intermediates and Unusual Molecules (ISRIUM), Ascona, Itália, Julho 2018. **Poster.**
33. Brás, E. M., Cabral, L. I. L., Fausto, R., Cristiano, M. L. S., *UV-induced Photolysis of a Dispiro-1,2,4-trioxolane with Antiparasitic Activity*, 24th IUPAC ICPOC, Faro, Portugal, Julho 2018. **Poster.**
34. Soares, M. I. L., Fausto, R., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Carbocyclic-Fused Chromenes via [3+2] Annulation of Allenic Esters with 3-Nitrochromenes*, 28th European Colloquium on Heterocyclic Chemistry, Lecce, Itália, Setembro 2018. **Comunicação Oral.**
35. Fausto, R., Golbedaghi, R., Tofani, M., Salehzadeh, S., Safaraabadi, S., *The Role of Perchlorate Anion on Dimerization of a Macroacyclic Binuclear Cu(II) Complex: Comparison with a Mononuclear Ni(II) Macroacyclic Complex*, 24th IUPAC ICPOC, Faro, Portugal, Julho 2018. **Poster.**
36. Ogruc-Ildiz, G., Nogueira, B. A., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., Henriques, M. S. C., Paixão, J. A., Fausto, R., *Structural Aspects and Reactivity of 5-Methylhydantoin*, 24th IUPAC ICPOC, Faro, Portugal, Julho 2018. **Poster.**
37. Lopes, S., Fausto, R., Khriachtchev, L., *Formic Acid Dimers in a Nitrogen Matrix*, EUCMOS 2018, Coimbra, Portugal, Agosto 2018. **Poster.**
38. Góbi, S., Nunes, C. M., Reva, I., Fausto, R., *Chemistry Triggered by Infrared Vibrational Excitation – A Case Study of Thiourea*, EUCMOS 2018, Coimbra, Portugal, Agosto 2018. **Poster.**
39. Reva, I., Nunes, C. M., Fausto, R., *Photochemistry of Aryl Nitrenes: Doorway to Elusive Intermediates and Tunneling Reactions*, 6as Jornadas Ibéricas de Fotoquímica, Aveiro, Portugal, Setembro 2018. **Comunicação Oral.**



40. Tabanez, A., Nogueira, B. A., Cardoso, R., Fausto, R., *Synthesis and Spectroscopic Characterization of Three New Coordination Complexes of 1-Methyl Hydantoin*, EUCMOS 2018, Coimbra, Portugal, Agosto 2018. **Poster.**
41. Nikitin, T., Lopes, S., Fausto, R., *Matrix Isolation Study of Fumaric Acid and Maleic Acid in Solid Argon*, EUCMOS 2018, Coimbra, Portugal, Agosto 2018. **Poster.**
42. Fausto, R., *A Magic Wand to Control Molecular Structure*, 24th IUPAC ICPOC, Faro, Portugal, Julho 2018. **Lição Plenária.**
43. Fausto, R., *A Magic Wand to Control Molecular Structure*, COST Action MOLIM – Workgroup 1 Meeting, Compenhaga, Dinamarca, Setembro 2018. **Lição Plenária.**
44. Fausto, R., *From the Photogeneration of Rare Molecules in Cryogenic Matrices to the Quest of High-Energy Crystals, the Unsuspected Parenthood of Rare Conformers*, III International Conference on Molecules, Polymers and Material Physics, Manaus, Brasil, Agosto 2018. **Lição Plenária.**
45. Reva, I., Lopes Jesus, A. J., Nunes, C. M., Fausto, R., *Selective Vibrational Excitation as a Tool for Conformational Control*, XXIV Encontro Luso-Galego de Química, Porto, Portugal, Novembro 2018. **Comunicação Oral.**
46. Roque, J. P. L., Reva, I., Rosado, M. T. S., Fausto, R., *Photochemistry of Matrix Isolated Benzimidazole*, XXIV Encontro Luso-Galego de Química, Porto, Portugal, Novembro 2018. **Poster.**
47. Lamsaf, H., Costa, B. F. O., Elghadraoui, E. H., Ijjaali, M., Fausto, R., Wagner, F. E., Oulmekki, A., *Structural, spectroscopic studies, and magnetic properties of new diphosphates:  $Zn^{2+}Fe_2^{3+}(P_2O_7)_2$  and  $Cu_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2(P_2O_7)_2$* , The phosphate days 2018: International Conference for Research on Phosphates and Derivatives, Benguerir, Marrocos, Novembro 2018. **Poster.**
48. Nunes, C. M., Reva, I., McMahon, R. J., Fausto, R., *Spectroscopic Observation of Quantum Tunneling: Discoveries on the Potential Energy Surfaces of Phenylnitrenes*, EUCMOS 2018, Coimbra, Portugal, Agosto 2018. **Comunicação Oral.**
49. Pinto, S. M. V., Kus, N., Fausto, R., *UV-Induced Conformational Isomerization Study of Matrix-Isolated 2-Amino-5-Chlorobenzoic Acid*, EUCMOS 2018, Coimbra, Portugal, Agosto 2018. **Poster.**
50. Brás, E. M., Cabral, L. I. L., Fausto, R., Cristiano, M. L. S., *Photochemistry of a Matrix Isolated Dispiro-1,2,4-Trioxolane: CriageeIntermediate Formation and Ring Expansion*, EUCMOS 2018, Coimbra, Portugal, Agosto 2018. **Poster.**
51. Lopes Jesus, A. J., Nunes, C. M., Reva, I., Fausto, R., *Conformational Control of an Aldehyde Fragment by Selective Vibrational Excitation of Interchangeable Remote Antennas*, EUCMOS 2018, Coimbra, Portugal, Agosto 2018. **Poster.**

52. Henriques, M. S. C., Ashoor, S. Et., Brás, E. M., Fausto, R., Paixão, J. A., *Structural and Spectroscopic Studies of Atropisomerism in Diphenylguanidinium Salts*, EUCMOS 2018, Coimbra, Portugal, Agosto 2018. **Poster.**

53. Ogruc-Ildiz, G., Celik, O., Atak, C., Yilmaz, A., Nur Kabuk, H., Kaygisiz, E., Ayan, A., Meriç, S., Fausto, R., *Lipid/Protein Ratio Contents of Soybean Mutants: A Raman Spectroscopic and Chemoimetrics Investigation*, EUCMOS 2018, Coimbra, Portugal, Agosto 2018. **Poster.**

54. Rosado, M. T. S., *Plastic crystal mesophases and polymorphism in globular diols*, Institute of Nuclear Physics, Cracóvia, Polónia, 2018. **Comunicação oral convidada.**

55. Silva, E., Luís, J. P. R., Castro, R. A. E., Maria, T. M. R., Rosado, M. T. S., Ramos Silva, M., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., *Roxadustat co-Crystals. A Preliminary Investigation on Synthon Competition*, Cost Action CM 1402 Crystallize meeting, Praga, República Checa, 2018. **Comunicação em painel.**

56. Évora, A. O. L., Minas da Piedade, M. E., Eusébio, M. E. S., Leyssens, T., *Synthesis and Energetics of Maleic acid-Glycine and Fumaric acid-Glycine Binary Crystals*, 2018 annual conference of the British Association of Crystal Growth, BACG, Limerick, Irlanda, 2018. **Comunicação em painel.**

57. Rosado, M. T. S., Silva, J. F. C., Ramos Silva, M., Minas da Piedade, M. E., Canotilho, J., Castro, R. A. E., Maria, T. M. R., Dryzek, E., Eusébio, M. E. S., *Plastic crystal formation in pinanediol enantiomers and racemate*, Annual Cost Action CM1402 meeting, Cork, Irlanda, 2018. **Comunicação em painel.**

58. Fausto, R., Nogueira, B. A., Ogruç-Ildiz, G., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., Henriques, M. S. C., Paixão, J. A., *Structural Aspects and Reactivity of 5-Methylhydantoin*, 24th International Conference on Physical Organic Chemistry, ICPOC24, Faro, Portugal, 2018. **Comunicação em painel.**

59. Aroso, R. T., Vinagreiro, C. S., Dabrowski, J. M., Pucelik, B., Dubin, G., Arnaut, L. G., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., *Structure-activity relationships of cationic imidazolyl phthalocyanines for use as antimicrobial agents*, International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines, Munique, Alemanha, 2018. **Comunicação oral.**

60. Vinagreiro, C. S., Aroso, R. T., Arnaut, L. G., Pereira, M. M., *Synthesis of Subphthalocyanine derivatives as alternative antibacterial photosensitizing agents*, International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines, Munique, Alemanha, 2018. **Comunicação oral.**

61. Pereira, M. M., Tomé, V., Calvete, M. J. F., *Potentialities of tetrapyrrolic macrocycles in multimodal molecular imaging modalities*, 10<sup>th</sup> International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-10), Munique, Alemanha, 2018. **Lição Plenária convidada.**

62. Pereira, M. M., Calvete, M. J. F., Pinto, S. M. A., Carrilho, R. M. B., Dias, L. D., Vinagreiro, C. S., Aroso, R. T., *Tetrapyrrolic macrocycles: Contributions for a sustainable World*, 7th EuChemMS Conference on Nitrogen Ligands, Lisboa, 2018. **Lição Plenária convidada.**

63. Pereira, M. M., *Luzitin S.A. - Uma start-up da Universidade de Coimbra: Novo medicamento para terapia fotodinâmica do cancer*, Curso de Desenvolvimento de Fármacos – Da Universidade à Indústria Farmacêutica, Universidade Estadual de Goiás, Anápolis, Brasil, 2018. **Lição Plenária.**

64. Pereira, M. M., *Síntese de Porfirinas e Derivados*, Curso de Desenvolvimento de Fármacos - Da Universidade à Indústria Farmacêutica, Universidade Estadual de Goiás, Anápolis, Brasil, 2018. **Lição Plenária.**

65. Pereira, M. M., Calvete, M. J. F., *Synthesis of Bioconjugates for PDT applications*, POLYTHEA Winter School – Fundamentals of Photodynamic Therapy, Universidade de Coimbra, Coimbra, 2018. **Lição Plenária.**

66. Carrilho, R. M. B., Dias, L. D., Gonzalez, A. C. S., Pereira, M. M., Claver, C., Masdeu-Bultó, A. M., "*Tetrapyrrolic macrocycle-based metal catalysts for CO<sub>2</sub>/epoxide coupling reactions*", 21<sup>st</sup> International Symposium on Homogeneous Catalysis (ISHC-XXI), Amsterdão, 2018. **Poster.**

67. Rodrigues, F. M. S., Henriques, C. A., Calvete, M. J. F., Carabineiro, S. A. C., Kollár, L., Figueiredo, J. L., Pereira, M. M., *Hybrid Nanocatalysts Based on Carbon Nanotubes for The Activation of Small Molecules*, 8<sup>th</sup> International Symposium on Carbon for Catalysis, Porto, Portugal, 2018. **Poster.**

68. Rodrigues, F. M. S., Henriques, C. A., Calvete, M. J. F., Carabineiro, S. A. C., Buijnsters, J. C., Figueiredo, J. L., Pereira, M. M., *Immobilization of Tetrapyrrolic Macrocycles onto Nanodiamonds*, 8<sup>th</sup> International Symposium on Carbon for Catalysis, Porto, Portugal, 2018. **Poster.**

69. Rodrigues, F. M. S., Carrilho, R. M. B., Pineiro, M., Martins, L. M. D. R. S., Pereira, M. M., Pombeiro, A. J. L., *Dual Rh-Fe/C-Scorpionate Catalysts for Sequential Hydroformylation / Acetalization of Olefins*, 7<sup>th</sup> EuChemS Conference on Nitrogen Ligands, Lisboa, Portugal, 2018. **Poster.**

70. Damas, L., *Metodologias Sustentáveis para o Desenvolvimento de Reações Catalíticas Sequenciais de Aminocarbonilação/Hidroformilação*, XXVI Congresso Ibero-Americano de Catálise CICAT, Coimbra, Portugal, 2018. **Comunicação Oral.**

71. Dias, L. D., Carrilho, R. M. B.; Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., *Development of Hybrid Metalloporphyrin based Magnetic Catalysts: Sustainable Sequential Epoxidation/CO<sub>2</sub> Cycloaddition Reactions*, International Conference on Porphyrin and Phthalocyanines, Munique, Alemanha, 2018. **Poster.**

72. Dias, L. D., Carvalho, A. L. M. B., Calvete, M. J. F., Marques, M. P. M., Pereira, M. M., *Metalloporphyrin as catalyst for synthesis of diastereomeric (-)-isopulegol epoxide: anti-proliferative activity against human osteosarcoma cells (MG-63)*, 7<sup>th</sup> EuChemS Conference on Nitrogen Ligands, Lisboa, 2018. **Poster.**

73. Dias, L. D., Carrilho, R. M. B., Tomé, V. A., Vinagreiro, C. S., Calvete, M. J. F., Pereira, M. M., *Catalisadores Derivados de Macrociclos Pirrólicos para Ativação de Oxigênio e Dióxido de*

Carbono, CICAT 2018 - XXVI Congresso Ibero-americano de Catálise, Coimbra, 2018. **Comunicação Oral.**

74. Dias, L. D., Vinagreiro, C. S., Aroso, R. T., Pineiro, M., Pereira, M. M., Paixão, F., *Princípios da Química Verde - O Exemplo da Síntese da Aspirina*, II Seminário Internacional de Educação em Ciências, Instituto Politécnico de Castelo Branco, 2018. **Comunicação oral.**

75. Vinagreiro, C. S., Aroso, R. T., Dias, L. D., Pereira, M. M., Paixão, F., *Resistência a Antibióticos: Também um problema de educação?*, II Seminário Internacional de Educação em Ciências, Instituto Politécnico de Castelo Branco, 2018. **Comunicação oral.**

76. Queiroz, J. E., Lemes, E., Awad, R., Pereira, P. A. G., Souza, P. E. N., Thomaz, D. V., Caetano, M. P., Gil, E. S., Vila Verde, G. M., Aquino, G. L. B., *Síntese e Avaliação da Atividade Antioxidante de Derivados  $\beta$ -cetoindóis*, 58<sup>o</sup> Congresso Brasileiro de Química, São Luís, Maranhão, 2018. **Poster.**

77. Machado, I. V., Vidal, H. D. A., Lemes, E., Queiroz, J. E., Awad, R., Silva, A. C., Melo-Filho, C. C., Moreira-Filho, J. T., Gomes, M. N., Aquino, G. L. B., *Directed synthesis of -ketoindoles derivatives from chalcones as potential Mcl-1 inhibitors for the treatment of cancer*, 17<sup>th</sup> BMOS - 17th Brazilian Meeting on Organic Synthesis, Salvador, Bahia, 2018. **Poster.**

78. Vidal, H. D. A., Machado, I. V., Lemes, E., Queiroz, J. E., Awad, R., Silva, C., Ellena, J., Aquino, G. L. B., *Characterization of amide bond conformers for 1-(isobutyryl)pyrrolidine-2-carboxylic acid*, 17<sup>th</sup> BMOS - 17th Brazilian Meeting on Organic Synthesis, Salvador, Bahia, 2018. **Poster.**

79. Pinho e Melo, T. M. V. D., *Heterocyclic Compounds from Nitrosoalkenes and Azoalkenes*, 28th Spanish-Portuguese Japanese Organic Chemistry Symposium, Kyoto, Japão, 2018. **Lição Plenária.**

80. Pinho e Melo, T. M. V. D., *Heterocycles from Nitrosoalkenes and Azoalkenes*, 28th European Colloquium on Heterocyclic Chemistry (EHC 2018), Lecce, Itália, 2018. **Lição Plenária.**

81. Pinho e Melo, T. M. V. D., *The Chemistry of Nitrosoalkenes and Azoalkenes in the Synthesis of Heterocyclic Compounds*, 4<sup>th</sup> Euro Organic Chemistry Congress, Londres, UK, 2018. **Comunicação Oral Convidada.**

82. Pereira, N.A. M., Mashayekhi, V., Laranjo, M., Hernandez, I. B., Botelho, M. F., Oliveira, S., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Promising nanobody-ring-fused chlorin conjugate as potential agent for targeted photodynamic therapy of cancer*, Photodynamic Therapy and Photodiagnosis Update 2018 (PDT-PD Update 2018), [Kochel am See](#), Alemanha, 2018. **Poster.**

83. Simões, C. J. V., Almeida, Z. L., Cardoso, A. L., Almeida, M. R., Beirão, J., Pinho e Melo, T. M. V. D., Saraiva, M. J., Brito, R. M. M., *Lead Optimization of Resilient Second-Generation Transthyretin Stabilizers for Multiple Target-Product Profiles: Where Do We Go From Here?*, XXIIth International Symposium on Amyloidosis, Kumamoto, Japão, 2018. **Poster.**

84. Campos, M., Pineiro, M., Brites, G., Pereira, N.A. M., Laranjo, M., Nascimento, B. F. O., Pinho e Melo, T. M. V. D., Botelho, M. F., *Disaggregation in Biological Medium of Promising Theranostic Agents for Cancer*, 25<sup>th</sup> Biennial Congress of the European Association for Cancer Research (EACR 25), Amsterdão, Holanda, 2018. **Poster.**

85. Brites, G., Laranjo, M., Pereira, N.A. M., Oliveira, A. S. R., Pineiro, M., Nascimento, B. F. O., Pinho e Melo, T. M. V. D., Botelho, M. F., *Novel 4,5,6,7-Tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridine fused Chlorins as Very Active Photodynamic Agents Against Melanoma nad Bladder Cancer Cells*, 25<sup>th</sup> Biennial Congress of the European Association for Cancer Research (EACR 25), Amsterdão, Holanda, 2018. **Poster.**

86. Nascimento, B. F. O., Pereira, N. A. M., Brites, G., Laranjo, M., Pineiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Novel temoporfin-related 4,5,6,7-tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridine-fused chlorins: synthetic details, structural characterization and cytotoxicity evaluation*, Photodynamic Therapy and Photodiagnosis Update 2018 (PDT-PD Update 2018), [Kochel am See](#), Alemanha, 2018. **Poster.**

87. Lopes, S. M. M., Silva, F. C., Ferreira, V. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Synthesis of Novel Bis(heterocycle)methanes from 3-Triazolynitrosoalkenes*, 28th European Colloquium on Heterocyclic Chemistry (EHC 2018), Lecce, Itália, 2018. **Poster.**

88. Almeida, Z. L., Simões, C. J. V., Nascimento, B. F. O., Cardoso, A. L., Cruz, P. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., Brito, R. M. M., *Rational design, synthesis and biological evaluation of inhibitors of transthyretin amyloidogenesis: Optimization of Thiazolinedione-based Derivatives*, Italian-Spanish-Portuguese Joint Meeting in Medicinal Chemistry, Palermo, Itália, 2018. **Poster.**

89. Grosso, C., Brigas, A., Lemos, A., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Natural Deep Eutectic Solvents in the Hetero-Diels-Alder Approach to Bis(indolyl)methanes*, Italian-Spanish-Portuguese Joint Meeting in Medicinal Chemistry, Palermo, Itália, 2018. **Poster.**

90. Gomes, C., Rosa, J. P., Campos, J., Pineiro, M., *Mechanochemistry for two-step synthesis of porphyrins*, 9th World Congress on Green Chemistry and Technology, Amsterdão, Holanda, 2018. **Poster.**

91. Santos, P., Murtinho, D., Lourenço, A. S.P., Araújo, J., Martins, F. R., Abrantes, A. M., Botelho, M. F., Serra, M. E. S., *Cytotoxicity of Ru (ii) and Ru (iii) salen complexes against breast and colorectal cancer cell lines*, 25th Biennial Congress of the European Association for Cancer Research (EACR25), Amsterdão, Alemanha, 2018. **Poster.**

92. Araújo, J., Santos, P., Martins, F. R., Serra, M. E. S, Lourenço, A. S. P., Abrantes, A. M., Botelho, M. F., Murtinho, D., *Synthesis of Cu(II) of complexes derived from imidazole and cytotoxic activity evaluation against breast and colorectal cancers*, 25th Biennial Congress of the European Association for Cancer Research (EACR25), Amsterdão, Alemanha, 2018. **Poster.**

93. Antunes, F. E., *Inovação científica e empreendedorismo social*, Salvador, Bahia, I Encontro em Produção, Gestão e Difusão do Conhecimento no Estado da Bahia, 2018. **Lição plenária.**

94. Antunes, F. E., Alves, L., Melro, E., Carvalho, F., *Cover-ED, Edible Biocoatings for Sliced Cold Meat Products*, International Conference on Food and Beverages, Tokio, 2018. **Comunicação oral.**
95. Martins, G., Baptista, C., Santos, C., Mateus, A., Antunes, F. E., *Microstructure of thermoplastic composites reinforced with wool and wood*, International Conference on Bio-based Polymers and Composites (BiPoCo 2018). Balantofured, Hungria, 2018. **Poster.**
96. Alves, L., Antunes, F. E., Medronho, B., *New approach to native cellulose aqueous solutions characterization*, ECIS 2018, Ljubljana, Eslovénia, 2018. **Poster.**
97. Alves, L., Melro, E., Carvalho, F., Antunes, F. E., *Tuning chitosan film properties by changing acidic dissolution conditions*, ECIS 2018, Ljubljana, Eslovénia, 2018. **Poster.**
98. Melro, E., Alves, L., Martins, G., Valente, A., Antunes, F. E., Cruz, M. I., Ramos, P., Carvalho, F., *Characterization of biopolymer solutions for the development of edible coatings*, International Conference on Bio-based Polymers and Composites (BiPoCo 2018). Balantofured, Hungria, 2018. **Poster.**
99. Pereira, J. C., *Unsupervised Analysis – revealing objects and respective contributions*, EMN Meeting, Viena, Austria, Junho 2018. **Keynote lecture.**
100. Pereira, J. C., *Analytical Method Validation*, Seminar in Quality Control, Charles University (Department of Analytical Chemistry), Praga, Republica checa, Julho 2018. **Seminário.**
101. Pereira, J. C., Pais, A. A. C. C., Burrows, H. D., Azevedo, J. C. R., Knapik, H. G., *Excitation-Emission Fluorescence analysis: resolving relevant underlying contributions*, XXXIV European Congress On Molecular Spectroscopy (EUCMOS 2018), Coimbra, Portugal, Agosto 2018. **Keynote lecture.**
102. Pereira, J. C., *Analysis of raw Excitation-Emission Fluorescence spectra*, Arras, France, Agosto 2018. **Seminário.**
103. Zarzycki, P. K., Lewandowska, L., Fenert, B, Pereira, J. C., *Cellulose and related biopolymers as active supports for development of hybrid microanalytical devices*, EMN Cellulose 2018, Barcelona, Espanha, Setembro 2018. **Keynote lecture.**
104. Matsushita, A. F. Y., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M., *An aqueous copper(II) luminescent sensor based on Tb(III)-containing coordinated gel composites*, 32nd Conference of the European Colloid and Interface Society, Ljubljana, Eslovénia, 2018. **Comunicação Oral.**
105. Valente, A. J. M., Cova, T. F., Pais, A. A. C. C., Soderman, O., *On the aggregation of cyclodextrins*, Joint Conference of EMLG/JMLG Annual Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan “Understanding of Molecular Liquids and Its Extension to New Fields”, Nagoya, Japão, 2018. **Comunicação Oral.**
106. Valente, A. J. M., *Cyclodextrins and their friends*, University of Alicante, Espanha, 2018. **Seminário por Convite.**

107. Burrows, H. D., Costa, T., Ramos, M. L., Justino, L. L. G., Valente, A. J. M., Gomes, E., Kraft, M., Scherf, U., *Nanostructuring Poly[N(1-aza-16-crown-6)carbamido-2,5-thienylene-alt-1,4-phenylene]} with Sodium Dodecylsulfate*, EUCMOS 2018, Coimbra, 2018. **Poster.**
108. Ramos, M. L., Justino, L.L.G., Costa, T., Valente, A. J. M., Burrows, H. D., *Developing New Paramagnetic Copper(II) Complexes Based on 8-Hydroxyquinoline-5-Sulfonate*, EUCMOS 2018, Coimbra, 2018. **Poster.**
109. Utzeri, G., Filho, C.M.C., Murtinho, D.M.B., Valente, A.J.M., *Sorption of phytopharmaceutical compounds by chitosan-based blend materials*, 32nd Conference of the European Colloid and Interface Society, Ljubljana, Eslovénia, 2018. **Poster.**
110. Matsushita, A. F. Y., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M., *Multicolour tunable emission of Eu,Tb(PSA)Phen composite*, 32nd Conference of the European Colloid and Interface Society, Ljubljana, Eslovénia, 2018. **Poster.**
111. Delgado-Pinar, E., Valente, A. J. M., Seixas de Melo, J. S., *A comprehensive investigation of the interaction of a 7-hydroxycoumarin derivative and cucurbit[7]uril in water*. 6a Jornadas Ibéricas de Fotoquímica, Aveiro, Setembro 2018. **Poster.**
112. Vareda, J. P., Valente, A. J. M., Durães, L., *Silica aerogels and xerogels as efficient heavy metal adsorbents*, 4th International Seminar on AEROGELS-2018, Hamburgo, 2018. **Poster.**
113. Verissimo, L. M. P., Estrada, F., Marques, J. M. C., Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M., *Limiting diffusion coefficients of pesticides*, Joint Conference of EMLG/JMLG Annual Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan "Understanding of Molecular Liquids and Its Extension to New Fields", Nagoya, Japão, 2018. **Poster.**
114. Marques, J. M. C., *Acerca da relação entre o potencial intermolecular e a estrutura de agregados*, Universidade Federal da Bahia, Brasil, 2018. **Seminário por Convite.**
115. Cova, T. F. G. G., Nunes, S. C., Pais, A. A. C. C., *Free-energy patterns in soft supramolecular nanostructures for drug delivery*. International Conference on Drug Delivery and Nanomedicine, 9-12 October, Estocolmo, Suécia, 2018. **Comunicação Oral.**
116. Nunes, S. C. C., Cova, T. F. G. G., Dias, R. S., Pais, A. A. C. C., *Polarizable surfaces, crowders and polyelectrolyte adsorption*. International Workshop: Polyelectrolytes in Chemistry, Biology and Technology, Singapura, 2018. **Comunicação Oral.**
117. Miranda, A., Cova, T. F. G. G., Mendes, M., Sousa, J., Vitorino, C. S., Pais, A. A. C. C., *Modeling of nanoparticle surface charge for targeting glioblastoma* XII Spanish-Portuguese Conference on Controlled Drug Delivery, Coimbra, Portugal, 2018. **Poster.**
118. Jorge, A. F., Aviñó, A., Grijalvo, S., Eritja, R., Fàbrega, C., *DNA nanostructures as chemotherapeutic systems for cancer treatment*, 3rd International Symposium on Nanoparticles/Nanomaterials and applications, Costa Caparica, Portugal, Janeiro 2018. **Comunicação oral.**

119. Jorge, A. F., Aviñó, A., Grijalvo, S., Pais, A. C. C., Eritja, R., Fàbrega, C., *DNA nanostructures as chemotherapeutic systems for colorectal cancer treatment*, IX Workshop del Departament de Nanotecnologia Química i Biomolecular, Barcelona, Março 2018. **Comunicação oral.**

120. Mendes, M., Miranda, A., Cova, T. F. G. G., Gonçalves, L., Almeida, A., Sousa, J., do Vale, M. L. C., Marques, E., Pais, A. C. C., Vitorino, C., *Tailoring ultra-small lipid nanoparticles for glioblastoma treatment* International Conference on Drug Delivery and Nanomedicine Estocolmo, Suécia, outubro 2018. **Comunicação oral convidada.**

121. Mendes, M., Miranda, A., Cova, T. F. G. G., Gonçalves, L., Almeida, A., Sousa, J., do Vale, M. L. C., Marques, E., Pais, A. C. C., Vitorino, C., *Ultra-small lipid nanoparticles for brain drug delivery*, III International Symposium on Nanoparticles/Nanomaterials and Applications, Caparica, Portugal, janeiro 2018. **Comunicação oral.**

122. Mendes, M., Nunes, S., Sousa, J., Pais, A. C. C., Vitorino, C., *Expanding Transdermal Delivery with Lipid Nanoparticles: A New Drug-in-NLC-in-Adhesive Design*, XII Spanish-Portuguese Conference on Controlled Drug Delivery, Coimbra, Portugal, janeiro 2018. **Poster.**

123. Cova, T. F. G. G., Nunes, S. C. C., Pais, A. A. C. C., *Volume and substituent effects in molecular recognition: a step forward in modulating soft supramolecular nanostructures by free energy calculations*, XIII Encontro Nacional de Química-Física/II Simpósio de Química Computacional, Faro, Portugal, 2018. **Poster.**

124. Martelo, L. M., Torres, E., Fedorov, A. A., Brites, M. J., Veiros, L. F., Burrows, H. D., Berberan-Santos, M. N., *Effects of Conjugation Extent of Oligoperylenes on their Spectroscopic Properties*, VI Jornadas Ibéricas de Fotoquímica, Aveiro, Setembro 2018. **Poster.**

125. Campos, M.G., Anjos, O., *Pólen Apícola: controlo de qualidade e legislação*. V Congresso Ibérico de Apicultura, Faculdade de Farmácia da Universidade de Coimbra, Coimbra, Portugal, 2018. **Lição Plenária.**

126. Miguel, P. V., Diana, A., Silva A., Ribeiro, A. C. F., Verissimo, L. M. P., Lobo, V., *Electric hot water bottle burst injuries: a new mechanism*, 2nd European Burns Association congress. De Doelen, Roterdão, Holanda, 2018. **Poster.**

127. Lobo, V., Verissimo, L. M. P., Valente, A. J. M., Estesio, M. A., Ribeiro, A. C. F., 2018, *Tracer diffusion coefficients of electrolytes and non-electrolytes in biological systems*, XXIV Encontro Luso-Galego de Química. Chem. Dep., Sci. Fac. Porto University, Porto, Portugal, 2018. **Poster.**

128. Verissimo, L. M. P., Afonso, D., Ribeiro, A. C. F., Lobo, V., *Rechargeable hot water bottles catastrophic burst forensics*, SPE 2018 – XXIII, Meeting of the Portuguese Electrochemical Society. Municipal Library Almeida Garrett, Porto, Portugal, 2018. **Poster.**

129. Pina, J, Stockhausen, V., Mendes, A., Burrows, H. D., Seixas de Melo, J. S., *The effect of the TiO<sub>2</sub> blocking layer deposition technique on the efficiency of triple-cation mixed-halide perovskites solar cells: Spray Pyrolysis vs. Atomic Layer Deposition*, Book of abstracts of the



7th EuCheMS Chemistry Congress, Energy poster abstracts section, PE65, Liverpool, UK, 2018. **Poster.**

130. Seixas de Melo, J. S., *In the footsteps of Perkin's and Caro's (synthesis of) mauveine*". Royal Society of Chemistry Historical Division, The Wheeler Lecture on the 150th Anniversary of the Birth of Fritz Haber and the History of Dyes on the 150th Anniversary of the Synthesis of Alizarin, Londres, UK, 2018. **Comunicação Oral Convidada.**

131. Varandas, A. J. C., *Assessing orbital-based vs density-based methods: CBS extrapolation with minimal and subminimal basis sets*, 58th Sanibel Symposium, St. Simons Island, USA, 2018. **Lição plenária.**

132. Varandas, A. J. C., *Extrapolation in Electronic Structure and Dynamics: Approximating Reality from Matters-of-fact*, 3rd General Meeting Molecules in Motion, Budapeste, Hungria, 2018. **Lição plenária.**

133. Varandas, A. J. C., *On the Born-Oppenheimer approximation and beyond*, International Conference on Quantum Dynamics and Applications, Atlanta, USA, 2018. **Lição plenária.**

134. Varandas, A. J. C., *Extrapolation in electronic structure and quantum dynamics: Where from, how, which implications?*, 10th International Symposium on Photodynamics and Related Aspects, Cartagena, Colombia, 2018. **Lição plenária.**

135. Varandas, A. J. C., *Extrapolation in quantum chemistry: From electronic structure calculations with traditional and optimized basis sets to reaction dynamics*", XLIV QUITEL, Santiago, Chile, 2018. **Lição plenária.**

136. Rodrigues, S. P. J., *On the Chemistry contributions for the Sustainable Development Goals of United Nations*, III Congresso Internacional, Educação, Ambiente de Desenvolvimento, Leiria, 2018. **Comunicação oral.**

137. Caridade, P. J. S. B., *Earth Observation: From data to applications*, Climate KIC @ University of Oporto, Porto, Portugal, 2018. **Lição plenária.**

138. Caridade, P. J. S. B., *Machine Learning in (Bio)-Aerosols Quantification*, MedSummit 2018, Coimbra, Portugal, 2018. **Lição plenária.**

139. Caridade, P. J. S. B., *The need of air quality forecast*, India Clean Air Initiative, Get in the Ring, Cascais, 2018. **Comunicação oral.**

140. Caridade, P. J. S. B., *Earth Observation and air quality monitoring using Copernicus*, INEOStart2018, Coimbra, Portugal, 2018. **Lição plenária.**

141. Caridade, P. J. S. B., *Sensor Observation of Urban Life*, NewSpace Atlantic Summit 2018, Lisboa, Portugal, 2018. **Lição plenária.**

142. Caridade, P. J. S. B., *Earth Observation and Civil Protection*, Copernicus4Regions initiative by the European Commission, the European Space Agency and the Network of European Regions Using Space Technologies, Lecture, Bruxelas, Belgica, 2018. **Lição plenária.**

143. Caridade, P. J. S. B., *Copernicus Services: CAMS*, Copernicus Ecosystem Workshop, Bruxelas, 2018. **Lição plenária.**

144. Rodrigues, S. P. J., *Moléculas psicotrópicas e literatura: uma visão química*, IX Congresso Internacional "História da Loucura, Psiquiatria e Saúde Mental", Coimbra, 2018. **Comunicação oral.**

145. Rodrigues, S. P. J., *Química e Saúde Pública – elementos da história de uma relação fundamental*, 1st Meeting of the History of Pharmacy and Public Health, Coimbra, 2018. **Comunicação oral.**

146. Pinto, P. B., Rodrigues, A. P., Sérgio P. J., *Química e Saúde Pública – Quimiofobia*, 1st Meeting of the History of Pharmacy and Public Health, Coimbra, 2018. **Poster.**

147. Rodrigues, S. P. J. *Desafios para a comunicação e a divulgação da química*, SciCom 2018, Figueira de Castelo Rodrigo, 2018. **Poster.**

148. Bezerra, F., Simões, C. J. V., Beirão, J., Saraiva, M. J., Brito, R. M. M., Almeida, M., *Targeting transthyretin amyloidosis in the eye with next-generation stabilizers: AT40 displays potent TTR stabilization in the human vitreous*, XVI<sup>th</sup> International Symposium on Amyloidosis, Kumamoto, Japão, 2018. **Poster.**

149. Cardoso, A. L., Nascimento, B. F. O., Almeida, Z. L., Victor, B. L., Simões, C. J. V., Brito, R. M. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., *AT50 Series: 2-thioxothiazolin-4-one derivatives as novel potent transthyretin stabilizers*, Italian-Spanish-Portuguese Joint Meeting in Medicinal Chemistry, Palermo, Itália, 2018. **Comunicação Oral.**

150. Castro, M. M., Campello, P.C., Silva, F., Paulo, A., Gano, L., Jurado, A. S., Cardoso, A. M., de Lima, M. C., Geraldés, C. F. G. C., Toth, E., Pallier, A., Mème, S., Lacerda, S., *Gold Nanoparticles as Multimodal Imaging Agents*, XIX Brazilian Meeting on Inorganic Chemistry (BMIC)/ VI Latin American Meeting on Biological Inorganic Chemistry (LABIC)/ VII Brazilian Meeting on Rare Earths (BMRE), Fortaleza, Brasil, Setembro 2018. **Comunicação Oral Convidada.**

151. Castro, M. M., *Homenagem ao Professor Doutor V. Gil - Vida e Obra*, VIII Ibero-American NMR Meeting/9<sup>th</sup> GERMN Biennial Meeting/6<sup>th</sup> Iberian NMR Meeting, Lisboa, Portugal, Junho 2018. **Comunicação Oral.**

152. Castro, M. M., Morais, C., Cardoso, A., Cunha, P., Aguiar, L., Vale, N., Gomes, P., Lima, M.C.P., Jurado, A.S., *Membrane Intercations with acyl-derivatives of S4<sub>13</sub>-PV peptide and their relevance to mediate nucleic acid delivery – A <sup>31</sup>P NMR and DSC study*, VIII Ibero-American NMR Meeting/9<sup>th</sup> GERMN Biennial Meeting/6<sup>th</sup> Iberian NMR Meeting, Lisboa, Portugal, Junho 2018. **Poster.**

153. Filipe, H. A. L., Javanainen, M., Salvador, A., Galvão, A., Vattulainen, I., Loura, L. M. S., Moreno, M. J., *Quantitative assessment of methods often used to obtain rate constants from biomolecular simulations - translocation of cholesterol across a lipid bilayer*, 6<sup>th</sup> International Iberian Biophysics Congress and X Iberoamerican Congress of Biophysics, Castellón, Espanha, Junho 2018. **Comunicação oral.**

154. Filipe, H. A. L., Loura, L. M. S., Moreno, M. J., *Permeation of Amphiphilic Drug-like Molecules through Symmetric and Asymmetric Lipid Bilayers – A Molecular Dynamics Simulation Study*, 665. WE-Heraeus-Seminar on Physical Approaches to Membrane Asymmetry, Physikzentrum Bad Honnef, Alemanha, Março 2018. **Poster.**

155. Geraldés, C. F. G. C., Cabrera, M.P., Cabral Filho, P.E., Silva, C. M. C. M., Oliveira, R. M. Castro, M. M. C. A., Costa, B. F. O., Henriques, M. S. C., Paixão, José A., Carvalho Jr, L. B., Santos, B. S., Hallwass, F., Fontes, A. Pereira, G.A.L., *Highly fluorescent and superparamagnetic nanosystem for biomedical applications*, 13<sup>th</sup> European Molecular Imaging Meeting - EMIM 2018, San Sebastián, Espanha, Março 2018. **Poster.**

156. Geraldés, C. F. G. C., *MRI and CEST: from paraCEST to diaCEST*, Advances in the Inorganic chemistry of MRI probes for contrast Enhancement (A.I.M.E.) Workshop, Fondazione Bracco, Milão, Itália, Outubro 2018. **Lição Plenária.**

157. Geraldés, C. F. G. C., Pinto, S.A.M., Calvete, M.J.F., Pereira, M.M., Laranjo, M.J., Soler, S., Gallardo, I., Pallier, A., Castro, M. M. C. A., Tóth, É., *A biocompatible redox MRI probe based on a MnII/MnIII porphyrin*, XIX Brazilian Meeting on Inorganic Chemistry (BMIC)/ VI Latin American Meeting on Biological Inorganic Chemistry (LABIC)/ VII Brazilian Meeting on Rare Earths (BMRE), Fortaleza, Brasil, Setembro 2018. **Comunicação Oral Convidada.**

158. Geraldés, C.F.G.C., *A personal experience on Lanthanide ions as NMR structural and imaging probes*, VIII Ibero-American NMR Meeting/9<sup>th</sup> GERMN Biennial Meeting/6<sup>th</sup> Iberian NMR Meeting, Lisboa, Portugal, Junho 2018. **Lição Plenária.**

159. Loura, L. M. S., *How probes gauge and affect the structure and dynamics of membranes*. 59<sup>th</sup> International Conference on the Bioscience of Lipids: Lipid Fluxes and Metabolism - From Fundamental Mechanisms to Human Disease, Helsínquia, Finlândia, Setembro 2018. **Comunicação oral Convidada.**

160. Martins, P. A. T., *Molecular crowding effects on the aqueous solubility of amphiphiles and their interaction with albumin and lipid bilayers*, International Workshop on Biological Membranes – Tiny Lipids with Grand Functions, Helsínquia, Finlândia, Agosto 2018. **Poster**

161. Meireles, J., Simões, C. J. V., Brito, R. M. M., *Classification of corneal permeability of drug-like compounds using data mining and machine learning*, 11<sup>th</sup> International Conference on Chemical Structures, Noordwijkerhout, Holanda, 2018. **Poster.**

162. Moreno, M. J., *Transient asymmetry in biomembranes due to association of small molecules. Methods for its characterization and relevance for membrane permeability*, 665. WE-Heraeus-Seminar on “Physical Approaches to Membrane Asymmetry”, Physikzentrum Bad Honnef, Alemanha, 2018. **Comunicação oral Convidada.**

163. Pinho, S. L.C. Amaral, J. S., Wattiaux, A., Duttine, M., Delville, M.-H., Geraldes, C.F.G.C., *Synthesis and characterization of rare earth orthoferrite  $ReFeO_3$  nanoparticles for biomedicine*, 10<sup>th</sup> International Conference on f-Elements (ICFE-10), Lausanne, Suíça, 2018. **Poster**.

164. Salvador, A. *Understanding thiol redox signaling through mathematical modelling*, Faculty of Medicine of the University of Oporto, Porto, Portugal, 2018. **Comunicação Oral Convidada**.

165. Santos, B.S., Cabral Filho, P.E., Cabrera, M.P., Cardoso, A.L.C., Santana, O.A., Geraldes, C.F.G.C., Pedrosa de Lima, M.C., Pereira, G.A.L., Fontes, A. *Multimodal highly fluorescent magnetic nanoplatfom to target transferrin receptors in cancer cells*, XIX Brazilian Meeting on Inorganic Chemistry (BMIC)/ VI Latin American Meeting on Biological Inorganic Chemistry (LABIC)/ VII Brazilian Meeting on Rare Earths (BMRE), Fortaleza, Brasil, Setembro 2018. **Comunicação Oral Convidada**.

166. Sousa, R.; Simões, M.; Vaz, D.C., Rodrigues, A., *RGA& GAI: On the characterization of two DELLA plant growth repressor proteins*, 10<sup>th</sup> International Congress on Structural Biology., Helsínquia, Finlândia, Outubro 2018. **Comunicação oral**.

167. Vaz, D. C., Brito, R. M. M., Mata, A. I., Luís, J. P., Alves, N. G., Simões, C. J. V., Pereira-Vaz, J., Duque, V., *Use of Molecular Interaction Fields to Understand Drug Resistance in HIV-1 Protease caused by Single-point Mutations*, 10<sup>th</sup> International Congress on Structural Biology, Helsínquia, Finlândia, 2018. **Poster**.

168. Araújo, J. G, Santos, P., Martins, R., Serra, M. E. S., Pires, A. S., Abrantes, A. M., Botelho, M. F., Murtinho, D., Cu(II) complexes derived from imidazole show cytotoxic activity in breast and colorectal cancers, 13th Young European Scientist (YES) Meeting, Porto, 2018. **Poster**

169. Santos, P., Murtinho, D., Pires, A. S., Araújo, J., Martins, F. R., Abrantes, A. M., Gonçalves, A. C. Botelho, M. F., Serra, M. E. S., *Synthesis of novel Ru (II) and Ru (III) salen and salan complexes and their cytotoxic effect in breast and colorectal cancer cell lines*, 13th Young European Scientist (YES) Meeting, Porto, 2018. **Poster**

170. Brites, G., Laranjo, M., Pereira, N. A. M., Campos, M., Oliveira, A. S. R., Pineiro, M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Botelho, M. F., *Photodynamic Therapy Based on Novel 4,5,6,7-Tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridine fused Chlorins Against Melanoma, Bladder and Oesophagus*, 3rd ASPIC International Congress, Lisboa, 2018. **Poster**

171. Campos, M., Pereira, N. A. M., Brites, G., Nascimento, B. F. O., Laranjo, M., Brites, G., Pineiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Aggregation in Biological Medium of Promising Theranostic Agents for Cancer: An Unwanted Reality*, 3rd ASPIC International Congress, Lisboa, 2018. **Poster**

172. Cunha, A. E. S., Cruz, P., Almeida, Z., Castanheira, P., Simões, C. J. V., Brito, R. M. M., *Discovery of Influenza NS1 Inhibitors: A combined In Silico and NMR Fragment-based Approach*, VIII Ibero-American NMR Meeting, Lisboa, 2018. **Poster**

173. Santos, C. I. A., Pinho e Melo, T. M. V. D., Haverá Química na Sigilografia?, Congresso Internacional de Heráldica e Sigilografia da Península Ibérica, Coimbra, 2018. **Comunicação oral**

174. Sharma, A., Reva, I., Fausto, R., Hesse, S., Xue, Z., Suhm, M. A., Nayak, S. K., Sathishkumar, R., Pal, R., Guru-Row, T. N., Study of Conformations of Hydroxyacetone Using Low Temperature FTIR and X-ray Techniques, National Conference on Emerging Trends in Material Science, Katra, India, 2018. **Poster**

175. Simões, J., Laranjo, M., Pereira, N. A. M., Brites, G., Nascimento, B. F. O., Pineiro, M., Pinho e Melo, T. M. V. D., Botelho, M. F., Cytotoxicity of Novel Pyridine-fused Chlorins as promising PDT agents against oesophagus cancer cell lines, 3rd ASPIC International Congress,, Lisboa, 2018. **Poster**

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

1. Aguiar, A., Oliveira, R., Farinhas, J., Ghica, M. E., Brett, C. M. A., Morgado, J., Sobral, A. J. F. N., *BODIPY small molecules as highly suitable donor materials for organic photovoltaic cells: Synthesis, Characterization and OPVC application*, 12<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Orgânica/5<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Terapêutica, Coimbra, 2018. **Poster**

2. Alves, C. D., Cardoso, A. L., Barrulas, P. C., Burke, A., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Asymmetric Neber Reaction in the Synthesis of 2-(Tetrazol-5-yl)-2H-Azirines*, 6<sup>th</sup> Portuguese Young Chemists Meeting (PYCheM2018), Setúbal, 2018. **Comunicação oral**

3. Alves, C. D., Cardoso, A. L., Barrulas, P. C., Burke, A., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Asymmetric Synthesis of 2-(Tetrazol-5-yl)-2H-Azirines*, 12<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Orgânica/5<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Terapêutica da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018. **Poster**

4. Araújo, J., Santos, P., Martins, F. R., Murtinho, D., Serra, M. E. S., Pires, A. S., Abrantes, A. M., Botelho, M. F., *Synthesis of Cu(II) complexes derived from imidazole and cytotoxic activity evaluation against breast cancer*, CIMAGO Annual Scientific Meeting, Coimbra, 2018. **Poster**.

5. Arnaut, L. G., *Designing Photoactive Molecules for Increased Therapeutic Benefit*, 12<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Orgânica/5<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Terapêutica da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018. **Lição plenária**

6. Arnaut, L. G., *From Photochemistry to Photomedicine: Health Solutions from Fundamental Science*, VI Jornadas Ibéricas de Fotoquímica, Aveiro, 2018. **Lição plenária**

7. Baptista, J. A., Eusébio, M. E. S., Pereira, M. M., *Beeswax as phase change material: chemical modification and mixtures with hydrogenated waste cooking oil and with paraffin*, Seminar

PCMs4Buildings – PCMs: Thermophysical characterization and buildings' applications, Coimbra, 2018. **Comunicação oral**

8. Baptista, J. A., Eusébio, M. E. S., Pereira, M. M., *Thermal behavior investigation of hydrogenated waste cooking oil and beeswax for Phase Change Materials*, XXIV Encontro Luso-Galego de Química, Porto, 2018. **Comunicação oral**

9. Baptista, J. A., Rodiles, X., Évora, A. O. L., Rosado, M. T. S., Maria, T. M. R., Castro, R. A. E., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., *2,4-Diaminopyrimidine as a model for trimethoprim cocrystallization?*, XXIV Encontro Luso-Galego de Química, Porto, 2018. **Poster**

10. Brandão, P., Burke, A. L., Pineiro, M., *Development of hybrid materials for Degradation of Antibiotics*, 4<sup>th</sup> Workshop CATSUS 2018, Oeiras, 2018. **Poster**

11. Brandão, P., Pinheiro, M., Seixas de Melo, J. S., Pineiro, M., *Microwave-assisted synthesis of Tryptanthrin from Indigo: an alternative route for an important scaffold in Medicinal Chemistry*, 12<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Orgânica/5<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Terapêutica da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018. **Poster**

12. Brás, E. M., Horta, P., Henriques, M. S. C., Murtinheira, F., Nogueira, F., O'Neill, P. M., Paixão, J. A., Fausto, R., Cristiano, M. L. S., *The Quinoline-Quinolone Tautomerism in Cyclisation Reactions of Aryl-enamines. Relevance for Quinolone-based Anti-malarials Design*, 12<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Orgânica/5<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Terapêutica da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, Portugal, 2018. **Poster**

13. Campos, M., Pereira, N. A. M., Brites, G., Nascimento, B. F. O., Laranjo, M., Pineiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Novos Fotossensibilizadores como Promissores Agentes Teragnósticos para o Tratamento do Cancro*, III Encontro Científico, NEQ/AAC, Coimbra, 2018. **Comunicação oral**

14. Campos, M., Pereira, N. A. M., Brites, G., Nascimento, B. F. O., Laranjo, M., Brites, G., Pineiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Novel platinum (II) 4,5,6,7-tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridine-fused chlorins as promising theranostic agents for cancer treatment*, 12<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Orgânica / 5<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Terapêutica da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018. **Poster**

15. Campos, M., Pereira, N. A. M., Brites, G., Nascimento, B. F. O., Laranjo, M., Brites, G., Pineiro, M., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Synthesis and characterization of promising theranostic agents for cancer*, 6<sup>th</sup> Portuguese Young Chemists Meeting (PYChem2018), Setúbal, 2018. **Comunicação oral**

16. Caridade, P. J. S. B., *Copernicus e a Observação da Terra: Satélites e a Química Ambiental*, University of Coimbra Summer School, Coimbra, 2018. **Comunicação oral convidada**

17. Carrilho, R. M. B., *The Contribution of Porphyrin Chemistry to CO<sub>2</sub> Conversion*, Workshop "SUNSTORAGE - Towards Solar Energy Storage", Coimbra, 2018. **Comunicação oral**

18. Cheminski, T., Pinho e Melo, T. M. V. D., Correia, C. R. D., Prediger, P., *Graphene oxide-based nanomaterial: preparation, characterization and application in water purification*, 12<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Orgânica / 5<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Terapêutica da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018. **Poster**
19. Damas, L., Pineiro, M., Pereira, M. M., *Catalytic Carbonylation Reactions: A Versatile Tool for Sustainable Synthesis of Heterocycles*, 4<sup>th</sup> Workshop CATSUS, Oeiras, 2018. **Comunicação oral**
20. Delgado-Pinar, E., Valente, A. M., Seixas de Melo, J. S., *A comprehensive investigation of the interaction of a 7-hydroxycoumarin derivative and cucurbit[7]uril in water*, VI Jornadas Ibéricas de Fotoquímica, Aveiro, 2018. **Poster**
21. Esteves, M. I., Soares, M. I. L., Lopes, S. M. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Síntese de Spiro- $\gamma$ -Lactamas Quirais Derivadas da L-Cisteína*, III Encontro Científico NEQ/AAC, Coimbra, 2018. **Comunicação oral**
22. Esteves, M. I., Soares, M. I. L., Lopes, S. M. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Synthesis of chiral spiro- $\gamma$ -lactams derived from L-cysteine*, 12<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Orgânica / 5<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Terapêutica da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018. **Poster**.
23. Estrada, F. G. A., Valente, A. J. M., Marques, J. M. C., *Assessing the affinity between polymers and pesticides by molecular dynamics simulations*, XIII Encontro Nacional de Química-Física/II Simpósio de Química Computacional, Faro, 2018. **Poster**
24. Eusébio, M. E. S., *Pharmaceutical co-crystals. Opportunities and challenges*, XIII Encontro de Química-Física da Sociedade Portuguesa de Química, Faro, 2018. **Comunicação oral convidada**
25. Filipe, H. A. L., Javanainen, M., Salvador, A., Galvão, A., Vattulainen, I., Loura, L. M. S., Moreno, M. J., *Quantitative assessment of methods used to obtain rate constants from molecular dynamics simulations - translocation of cholesterol across a lipid bilayer*, Biophysics Party - 1st Meeting of Young Biophysicists, Lisboa, 2018. **Poster**
26. Geraldês, C.F.G.C., *Agentes de contraste para Imagem Molecular - Uma ferramenta do século XXI vista por um químico*, Academia de Ciências de Lisboa, Lisboa, 2018. **Comunicação oral convidada**.
27. Gomes, C., Campos, J. P., Pineiro, M., *Síntese de Porfirinogénios via Mecanoquímica e oxidação para a obtenção de porfirinas*, III Encontro Científico do Núcleo de Estudantes de Química, Coimbra, 2018. **Comunicação oral**
28. Gomes, C., Pineiro, M., Martins, L. M. D. R. S., Royo, B., *Sustainable Synthesis of N-heterocyclic ligands, synthesis of organometallic complexes and catalytic evaluation*, 4<sup>th</sup> Workshop CATSUS 2018, Oeiras, 2018. **Poster**

29. Gomes, C., Rosa, J. P., Campos, J. P., Pineiro, M., *Synthesis of porphyrins under mechanical activation*, 12º Encontro Nacional de Química Orgânica / 5º Encontro Nacional de Química Terapêutica da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018. **Poster**
30. Grosso, C., Brigas, A., Pinho e Melo, T. M. V. D., Lemos, A., *Natural Deep Eutectic Solvents in the Synthesis of Bis(indoly)methanes*, 12º Encontro Nacional de Química Orgânica / 5º Encontro Nacional de Química Terapêutica da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018. **Poster**
31. Lopes, S. M. M, Gomes, C. S. B., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Novel Chiral Hexacyclic Steroids by Exploring the Reactivity of Steroidal Azadienes Towards Enamines*, 12º Encontro Nacional de Química Orgânica / 5º Encontro Nacional de Química Terapêutica da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018. **Poster**
32. Luís, J. P, Mata, A. I., Alves, N. G., Simões, C. J. V., Pereira-Vaz, J., Vaz, D. C., Duque, V., Brito, R. M. M., *Influence of codon 35 amino acid insertion in HIV-1 protease: insights from molecular dynamics*, EJBCE, Encontro de Jovens Investigadores em Biologia Computacional Estrutural, Porto, 2018. **Poster**
33. Luís, J. P., Alves, N. G., Simões, C. J. V., Pereira-Vaz, J., Vaz, D. C., Duque, V., Brito, R. M. M., *A new structure-based anti-viral resistance prediction algorithm: HIV-1 protease as a case study*, 12º Encontro Nacional de Química Orgânica / 5º Encontro Nacional de Química Terapêutica da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018. **Poster**
34. Marques, J. M. C., *Application of evolutionary algorithms to solve difficult problems in physical chemistry: geometry optimization and fitting*, XIII Encontro Nacional de Química Física/II Encontro de Química Computacional, Faro, 2018. **Poster**
35. Mata, A. I., Gomes-da-Silva, L. C., Brito, R. M. M., Arnaut, L. G., *Potential Beyond the Use of Conventional Photodynamic Therapy*, 12º Encontro Nacional de Química Orgânica / 5º Encontro Nacional de Química Terapêutica da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018. **Poster**
36. Mata, A. I., Luís, J. P., Alves, N. G., Simões, C. J. V., Pereira-Vaz, J., Vaz, D. C., Duque, V., Brito, R. M. M., *Análise do impacto da mutação de inserção no codão 35 na protease do VIH-1 com recurso a técnicas computacionais*, V Congresso Nacional de Virologia, Porto, 2018. **Poster**
37. Matsushita, A. F. Y., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M., *Effect of Eu(III) and Tb(III) chloride on the gelification behavior of poly(sodium acrylate)*, XIII Encontro Nacional de Química-Física/II Simpósio de Química Computacional, Faro, 2018. **Comunicação oral**
38. Mazivila, S. J., Castro, R. A. E., Leitão, J. M. M., Esteves da Silva, J. C. G., *In-line monitoring of green synthesis of a novel lamivudine-theophylline co-crystal using FT-IR spectroscopy and MCR-ALS*, 9<sup>th</sup> Meeting of the SPQ Analytical Chemistry Division (ANALYTICA 2018), Porto, 2018. **Comunicação oral**



39. Nascimento, B. F. O., Almeida, Z. L., Simões, C. J. V., Victor, B. L., Cardoso, A. L., Brito, R. M. M., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Highly active 2-thioxothiazolidin-4-one derivatives for transthyretin protein stabilization and amyloid fibril inhibition*, 12<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Orgânica / 5<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Terapêutica da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018. **Poster**

40. Nogueira, B. A., Fausto, R., *Structure and Reactivity of 5-Methylhydantoin in Different Experimental Conditions*, Ciência 2018 - Encontro com a Ciência e a Tecnologia em Portugal, Lisboa, 2018. **Poster**

41. Nunes, C. M., Reva, I., Fausto, R., *Quantum Tunneling in Chemistry: 2-Formylphenylnitrene - A Tale of Two Impossible Reactions*, 12<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Orgânica/5<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Terapêutica da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018. **Comunicação oral convidada**

42. Nunes, S. C. C., Cova, T. F. G. G., Dias, R. S., Pais, A. A. C. C., *Beyond charge density: what dictates polyelectrolyte adsorption upon multicomponent responsive surfaces?*, XIII Encontro Nacional de Química-Física/II Simpósio de Química Computacional, Faro, 2018. **Comunicação oral**

43. Pereira, N. A. M., Laranjo, M., Pina, J., Oliveira, A. S. R., Ferreira, J. D., Sánchez, C. S., Lopes, J. C., Gonçalves, A. C., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Advances on Photodynamic Therapy of Cancer Through Novel Ring-Fused 5,15-Diphenylchlorins*, 12<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Orgânica/5<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Terapêutica da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018. **Comunicação oral**

44. Pereira, R. C., Pontinha, A. D. R., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *Water soluble electrolytes for redox flow batteries: a spectral, photophysical and electrochemical study*, VI Jornadas Ibéricas de Fotoquímica, Aveiro, 2018. **Poster**

45. Pereira, R.C., Pontinha, A. D. R., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *Water soluble acridones for Redox Flow Batteries*, 6PYCheM – 6<sup>th</sup> Portuguese Young Chemists Meeting, Setúbal, 2018. **Poster**

46. Perpétuo, N. C., Campos, M. G., Trincão, P. R., Coutinho, A. P., *Conhecer as plantas tóxicas para prevenir os envenenamentos vegetais pediátricos: a importância da promoção da literacia científica*, 1<sup>o</sup> Congresso de Medicina Preventiva, Porto, 2018. **Comunicação oral**

47. Perpétuo, N. C., Campos, M. G., Trincão, P. R., Coutinho, A. P., *História de envenenamentos vegetais famosos*, 1<sup>a</sup> Jornadas de História da Farmácia e Saúde Pública. Coimbra, 2018. **Comunicação oral**

48. Perpétuo, N. C., Campos, M. G., Trincão, P.R., Coutinho, A. P., *As plantas venenosas na magia, bruxaria e nos rituais: mitos, verdades e perigos*, 5<sup>o</sup> Congresso SciComPT – Objectos da Ciência, Coimbra, 2018. **Poster digital**

49. Perpétuo, N. C., Campos, M. G., Trincão, P.R., Coutinho, A. P., *Convivendo com o perigo: plantas tóxicas em escolas e espaços verdes urbanos*, III Congresso da Associação Portuguesa

de Ciências Forenses/XII Jornadas Científicas de Ciências do Instituto Universitário de Ciências da Saúde, Porto, 2018. **Poster**

50. Perpétuo, N. C., Coutinho, A. P., Campos, M. G., Trincão, P. R., *Plantas venenosas das escolas de Coimbra e Figueira de Castelo Rodrigo: todas diferentes ou todas iguais?*, 6º Congresso SciComPT–Ciência Aberta à Sociedade: Participação e Inclusão em Comunicação de Ciência, Figueira de Castelo Rodrigo, 2018. **Poster**

51. Perpétuo, N. C., Coutinho, A. P., Campos, M. G., Trincão, P. R., *As plantas tóxicas entre nós! Promover a literacia científica e a compreensão pública das plantas tóxicas – Fase I.*, Encontro Ciência 2018, Lisboa, 2018. **Poster**

52. Piccirillo G., Pereira, M. M., Tomé V. A., Eusébio, M. E. S., Calvete. M. J. F., *Development of hybrid materials for degradation of antibiotics*, 4<sup>th</sup> Workshop CATSUS, Oeiras, 2018. **Poster**

53. Pina, J., *Fast Kinetics & Spectroscopy: Applications in materials science*, Workshop “SUNSTORAGE - Towards Solar Energy Storage”, Coimbra, 2018. **Comunicação oral**

54. Pina, J., *Harvesting and storage solar energy (Sunstorage)*, Encontro Ciência 2018 - Science and Technology in Portugal Summit, Lisboa, 2018. **Comunicação oral**

55. Pina, J., Rodrigues, A. C. B., Alnady, M., Dong, W., Scherf, U., Seixas de Melo, J. S., *Aggregation-Induced Emission vs. Aggregation-Caused Quenching in Tetraphenylethene-substituted Polythiophenes*, VI Jornadas Ibéricas de Fotoquímica, Aveiro, 2018. **Poster**

56. Pineiro, M., *Green Chemistry, solving the pollution problem*, Encontro Ciência'18, Lisboa, 2018. **Comunicação oral.**

57. Pineiro, M., *Química Verde e Química Sustentável*, Universidade de Verão – DQ-FCTUC, Coimbra, 2018. **Comunicação oral.**

58. Pinheiro, D., Brandão, P., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *A comprehensive investigation of tryptanthrin, an alkaloid from indigo and isatin*, 6<sup>th</sup> Portuguese Young Chemists Meeting (6thPYCHEM), Setúbal, 2018. **Poster**

59. Pinheiro, D., Pineiro, M., Pina, J., Seixas de Melo, J. S., *Mono- and di-substituted indigo derivatives: synthesis and excited state characterization*, VI Jornadas Ibéricas de Fotoquímica, Aveiro, 2018. **Poster**

60. Pinto, C., Seixas de Melo, J. S., *The molecules of color in Portuguese postage stamps*, 6PYCheM – 6<sup>th</sup> Portuguese Young Chemists Meeting, Setúbal, 2018. **Comunicação oral**

61. Pinto, P., Branquinho, A. P., Rodrigues, Sérgio P. J., *Química e Saúde Pública – Quimiofobia*, 7º Encontro da Divisão de Ensino e Divulgação da Química da SPQ (VIIEDDQ), Vila Nova de Gaia, 2018. **Comunicação oral**

62. Pontinha, A. D. R., Pereira, R. C., Pineiro, M., Seixas de Melo, J. S., *Antraquinones as electrolytes for redox flow batteries: a comprehensive spectral, photophysical and electrochemical study*, VI Jornadas Ibéricas de Fotoquímica, Aveiro, 2018. **Poster**
63. Rodrigues, A. C. B., Pina, J., Dong, W., Scherf, U., Seixas de Melo, J. S., *Aggregation Induced Emission in Phenothiazine -TPE and -TPAN polymers*, VI Jornadas Ibéricas de Fotoquímica, Aveiro, 2018. **Poster**
64. Rodrigues, F. M. S., Pineiro, M., Martins, L. M. D. R. S., Pombeiro, A. J. L., Pereira, M. M., *Hydroformylation: A Central Reaction for Sequential Transformation of Olefins into Alcohols, Acetals and Amines*, 4<sup>th</sup> Workshop CATSUS, Oeiras, 2018. **Comunicação oral**
65. Rodrigues, F. M. S., Pineiro, M., Martins, L. M. D. R. S., Pombeiro, A. J. L. Pereira, M. M., *Hydroformylation - A Central Tool for Sequential Processes in Organic Synthesis*, 4<sup>th</sup> Workshop CATSUS, Oeiras, 2018. **Poster**
66. Rodrigues, S. P. J., *Desafios na Divulgação da Química*, 7<sup>o</sup> Encontro da Divisão de Ensino e Divulgação da Química da SPQ (VIIEDDQ), Vila Nova de Gaia, 2018. **Lição plenária**
67. Rodrigues, S. P. J., *Química?! Nas coisas comuns e extraordinárias de um mundo mais sustentável*, 3<sup>o</sup> Encontro de Ciência, Vila Nova de Famalicão, 2018. **Comunicação oral convidada**
68. Roque, J. P. L., Rosado, M. T. S., Reva, I., Fausto, R., *Pyrrole-2-Carboxylic Acid: A Conformational Switch*, XIII Encontro Nacional de Química-Física, Faro, 2018. **Poster**
69. Rosado, M. T. S., Castro, R. A. E., Maria, T. M. R., Canotilho, J., Eusébio M. E. S., *Application of computational methods to the study of co-crystal formation*, Encontro de Química-Física da Sociedade Portuguesa de Química, Faro, 2018. **Comunicação oral**
70. Rosário-Ferreira, N., Melo, R., Moreira, I. S., Brito, R. M. M., *A Molecular Dynamics Insight to Non-Structural Protein 1 (NS1) – A Hub Protein Essential for Influenza Infection*, 6<sup>o</sup> Encontro de Jovens Investigadores de Biologia Computacional e Estrutural, Porto, 2018. **Poster**
71. Santos, P., Murtinho, D., Pires, A. S., Araújo, J., Martins, F. R., Abrantes, A. M., Botelho, M. F., Serra, M. E. S., *Cytotoxicity of Ru(II) and Ru(III) Salen complexes against breast cancer cell lines*, CIMAGO Annual Scientific Meeting, Coimbra, 2018. **Poster**
72. Sarmiento, D., Galvão, A., Seixas de Melo, J. S., *On High Stability of Indirubin'*, VI Jornadas Ibéricas de Fotoquímica, Aveiro, 2018. **Poster**
73. Seixas de Melo, J. S., *"Sunstorage - Recolha e Armazenamento de Luz Solar"*, III Encontro Científico NEQ/AAC, Coimbra, Portugal, 2018. **Comunicação oral convidada**
74. Silva, A. M. D., Évora, A. O. L., Castro, R. A. E., Maria, T. M. R., Rosado, M. T. S., Choquesillo-Lazarte, D., Canotilho, J., Eusébio, M. E. S., *Diflunisal co-crystals: an opportunity to develop improved formulations of existing drugs*, XIII Encontro de Química-Física da Sociedade Portuguesa de Química, Faro, 2018. **Poster**

75. Silva, J. F. C., Rosado, M. T. S., Ramos Silva, M., Minas da Piedade, M. E., Canotilho, J., Castro, R. A. E., Maria, T. M. R., Dryzek, E., Eusébio, M. E. S., *Polymorphism of pinanediol, a plastic crystal former*, XIII Encontro de Química-Física da Sociedade Portuguesa de Química, Faro, 2018. **Poster**

76. Simões, C. J. V., Almeida, Z. L., Victor, B. L., Nascimento, B. F. O., Cardoso, A. L., Pinho e Melo, T. M. V. D., Brito, R. M. M., *Discovery of 2-thioxothiazolidin-4-ones as potent transthyretin stabilizers: a story of pride and prejudice in the quest for a better drug*, 12<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Orgânica / 5<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Terapêutica da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018. **Comunicação oral convidada**

77. Simões, J. C. S., Pereira, N. A. M., Brites, G., Nascimento, B. F. O., Oliveira, A. S. R., Pineiro, M., Pina, J., Seixas de Melo, S., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Novel PEGylated 4,5,6,7-Tetrahydropyrazolo[1,5-a]pyridine-fused Chlorins*, 12<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Orgânica/5<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Terapêutica da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018. **Poster**

78. Simões, J., Laranjo, M., Pereira, N. A. M., Brites, G., Nascimento, B. F. O., Pineiro, Botelho, M. F., Pinho e Melo, T. M. V. D., *A new generation of ring-fused chlorins as promising PDT agents*, 6th Portuguese Young Chemists Meeting (PYChem2018), Setúbal, 2018. **Comunicação oral**

79. Soares, H. T., Simões, S., Arnaut, L. G., et al. "*Topical Photodynamic Therapy of skin disorders: a novel low molecular weight and photostable photosensitizer*", Encontro Ciência '18, Encontro com a Ciência e Tecnologia em Portugal, Lisboa, 2018. **Poster**

80. Soares, H. T., Simões, S., Arnaut, L. G. "*Intraepidermal delivery of a new bacterichlorin with low molecular weight*", 12<sup>th</sup> National Organic Chemistry Meeting and the 5<sup>th</sup> National Medicinal Chemistry Meeting, Coimbra, 2018. **Poster**

81. Soares, M. I. L., Fausto, R., Pinho e Melo, T. M. V. D., *Synthesis of Cyclopenta[c]chromenes via Phosphane-catalyzed [3+2] Annulation of Allenolates with 3-Nitrochromenes*, 12<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Orgânica e 5<sup>o</sup> Encontro de Química Terapêutica da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018. **Poster**

82. Sousa, F., Serra, M. E. S, Murtinho, D., *(R)-10-Camphorsulfonic acid based ligands for enantioselective alkylation of aldehydes*, 12<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Orgânica (12ENQO) e 5<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Medicinal (5ENQT) da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018. **Poster**

83. Sousa, F., Serra, M. E. S, Murtinho, D., *Derivados dos ácidos (S)- e (R)-10-canforsulfônico como ligandos para reações de alquilação enantiosseletiva de aldeídos*, III Encontro Científico Encontra-te com a Química (NEQAAC), Coimbra, 2018. **Comunicação oral**.

84. Sousa, J. F. M., Murtinho, D., Vitorino, C., Pais, A. A. C. C., Valente, A. J. M., *Improving the mechanical and conducting properties of poly(oxy-1,4-phenyleneoxy-1,4-phenylene carbonyl-*

*1,4-phenylene*) membranes, Workshop SUNSTORAGE “Towards Solar Energy Storage”, Univ. Coimbra, Coimbra, 2018. **Comunicação oral**

85. Tavares, N. C. T., Neves, C. T., Milne, B. F., Murtinho, D., Pais, A. A. C. C., Serra, M. E. S, *Molecular improvement of thiazolidine-type compounds and their catalytic activity in asymmetric C-C coupling reactions.*, CATSUS Workshop IV, Lisboa, 2018. **Comunicação oral e Poster**

86. Tavares, N. C. T., Serra, M. E. S, Murtinho, D., *Enantioselective Ethylation of Aldehydes Assisted by Chiral Thiazolidines: Catalytic Parameters and Ligand Scope*, 12<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Orgânica (12ENQO) e 5<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Medicinal (5ENQT) da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018. **Comunicação oral e Poster.**

87. Verissimo, L. M. P., Afonso, D., Ribeiro, A. C. F., Lobo, V., *De Caxemira à China: rebranding de sacos de água quente eléctricos*, XI Congresso Nacional de Queimados, Associação Amigos dos Queimados, Pedrogão Grande, 2018. **Comunicação oral convidada**

### **ORGANIZAÇÃO DE CONFERÊNCIAS CIENTÍFICAS E SEMINÁRIOS Nacionais e Internacionais**

1. Serpa, C., Coordenador da Comissão Organizadora, Frontiers in Medicinal Chemistry Summer School, Penela, Portugal, 2018.

2. Arnaut, L. G., Organizador de Simpósio na 39<sup>th</sup> Meeting of the American Society for Photobiology, Tampa, Florida, EUA, 2018.

3. Gomes-da-Silva, L. C., Organizadora do Inter-School “The Fundamentals of Photodynamic Therapy”, Innovative Training Network POLYTHEA, Coimbra, 2018.

4. Fausto, R., Presidente das Comissões Científicas Internacional e Nacional e da Comissão Organizadora, XXXIV European Congress on Molecular Spectroscopy – EUCMOS 2018, Coimbra, 2018.

5. Fausto, R., Co-Presidente da Comissão Organizadora, XXVI International Congress on Physical Organic Chemistry, Faro, 2018.

6. Pereira, M. M., Membro da Comissão Científica Nacional, 7th EuChemMS Conference on Nitrogen Ligands, Lisboa, 2018.

7. Pereira, M. M., Presidente da Comissão Organizadora Local, XXVI Congresso Ibero-Americano de Catálise (CICAT2018), Coimbra, 2018.

8. Pereira, M. M., Calvete, M. J. F., Pinto, S. M. A., Carrilho, R. M. B., Vinagreiro, C., Piccirillo, G., Rodrigues, F., Damas, L., Carrilho, R., Tomé, V., Dias, L., Aroso, R., Gonzalez, A., Comissão Organizadora Local, XXVI Congresso Ibero-Americano de Catálise (CICAT2018), Coimbra, 2018.

9. Pereira, M. M., Calvete, M. J. F., Pinto, S. M. A., Carrilho, R. M. B., Vinagreiro, C., Piccirillo, G., Rodrigues, F., Damas, L., Carrilho, R., Tomé, V., Dias, L., Aroso, R., Gonzalez, A., Comissão Organizadora das Olimpíadas de Química Júnior (semi-finais regionais), Coimbra, 2018.
10. Grosso, C., Cardoso, A. L., Murtinho, D., Serra, E., Alves, N., Alves, A., Tavares, N., Brandão, P., Pereira, N. A. M., Nascimento, B. F. O., Soares, M. I. L., Lopes, S. M. M., Pineiro, M., Membros da Comissão Organizadora, 12<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Orgânica/5<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Medicinal da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018.
11. Pinho e Melo, T. M. V. D., Membro da Comissão Científica e Chairman, 12<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Orgânica/5<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Medicinal da Sociedade Portuguesa de Química, Coimbra, 2018.
12. Piñeiro, M., Brandão, P., Membros da Comissão Organizadora, XXVI Congresso Ibero-Americano de Catálise (CICAT 2018), Coimbra, 2018.
13. Pinho e Melo, T. M. V. D., Honourable Guest and Poster Judge, 4<sup>th</sup> Euro Organic Chemistry Congress, London, UK, 2018.
14. Soares, M. I. L., Membro da Comissão Organizadora, XXXIV European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS), Coimbra, 2018.
15. Valente, A., Membro do International Advisory Committee, 22<sup>nd</sup> International Symposium on Surfactants in Solution (SIS 2018), Norman, Oklahoma, USA, 2018.
16. Valente, A., Co-chairman, Workshop on How to protect water, soil, and plants production all together, Coimbra, Portugal, 2018.
17. Marques, J. M. C., Membro da Comissão Organizadora e da Comissão Científica, XIII Encontro Nacional de Química Física/II Simpósio de Química Computacional, Faro, 2018.
18. Pais, A. A. C. C., Marques, J. M. C., Nunes, S. C. C., Cova, T. F. G. G., Comissão Organizadora, Workshop “Viruses and Nucleic acids”, Coimbra, 2018.
19. Burrows, H. D., Coordenador, Towards Solar Energy Storagee – SunStorage Workshop, Coimbra, 2018.
20. Burrows, H. D., Seixas de Melo, J. S, Membros da Comissão Científica, VI Jornadas Ibéricas de Fotoquímica, Aveiro, 2018.
21. Burrows, H. D., Membro da Comissão Científica Nacional, 24th IUPAC International Conference on Physical Organic Chemistry, Faro, 2018.
22. Campos, M. G., Presidente do V Congresso Ibérico de Apicultura 2018, Coimbra, 2018.
23. Varandas, A. J. C., Membro da Comissão Científica, International Meeting on Photodynamics and Related Aspects, Cartagena, Colombia, 2018.

24. Varandas, A. J. C., Membro da Comissão Científica Internacional, CHITEL2016-XLIV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Santiago, Chile, 2018.
25. Rodrigues, S. P. J., Membro da Comissão Científica, 7º Encontro da Divisão de Ensino e Divulgação da Química da SPQ (VIIEDQ), Vila Nova de Gaia, 2018.
26. Rodrigues, S. P. J., Presidente da Comissão Organizadora e membro da Comissão Científica, 2º Encontro de História da Ciência para o Ensino (2EHCE), Coimbra, 2018.
27. Caridade, P. J. S. B., Membro da Comissão Científica da Startup Europe Week, promoted by European Commission, Coimbra/Lisboa, Portugal, 2018.
28. Brito, R. M. M., Organizador, NMR Basics 2018: Theory, Processing and Analysis, UC NMR Core Facility, Coimbra, 2018.
29. Brito, R. M. M., Organizador, NMR Focus 2018: NMR in health and disease: From Protein-Ligand Interactions to Small Molecules in Tissues, UC NMR Core Facility, PTNMR PhD Program, Coimbra, 2018.
30. Geraldes, C.F.G.C., Membro da Comissão Científica, 12<sup>th</sup> Inorganic and Bioinorganic Chemistry Conference, Porto, 2018.
31. Moreno, M.J., Organizadora, Mini Symposium on P-glycoprotein, Coimbra, 2018.
32. Moreno, M.J., Organizadora, Mini-Symposium - The life of Inorganic Chemistry: from molecules to imaging, Coimbra, 2018.
33. Moreno, M.J., Organizadora, WBC 2018 – Workshop on Biological Chemistry, Computational tool to predict drug bioavailability – from molecules to cells, Nespereira, 2018.
34. Salvador, A., Coordenador, Summer School on Computational Biology, Coimbra, 2018.
35. Salvador, A., Co-organizador e chairman de simpósio, A systems oriented perspective on key processes in redox stress and regulation, 19th Biennial Meeting of the Society for Free Radical Research International, Lisboa, 2018.

## TESES

### Teses de Doutoramento

1. Cesar Marcos Cavalcante Filho, *Desenvolvimento de géis para a remoção de hidrocarbonetos de petróleo*, Universidade de Coimbra, 2018.  
[Orientação: Valente, A. J. M.]
2. Poonam Singh, *Development and characterization of cellulose based systems for the entrapment and delivery of probiotic bacteria*. Universidade de Coimbra, 2018.  
[Orientação: Lindman, B.; Valente, A. J. M.]

3. Tânia Firmino Guerra Guerreiro da Cova, *Simulation of Supramolecular Systems for Drug Delivery based on Inclusion Complexes*, Tese de Doutoramento, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Pais A.A. C. C.]

4. Carlos Murilo Rocha, *Potential Energy Surfaces of Elemental Carbon Clusters*, PhD in Chemistry, Theoretical & Computational Chemistry University of Coimbra, Coimbra, Portugal, 2018.

[Orientação: Varandas, A. J. C.]

## Teses de Mestrado

1. Pedro Miguel Silveirinha Paulino, *Mecanismos de Geração de Espécies Reativas de Oxigénio em Terapia Fotodinâmica*, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Arnaut, L. G.]

2. Joana Filipa Carvalho da Silva, *Estudo de polimorfismo, estrutura e capacidade de formação de cristais plásticos de dois dióis globulares*, Mestrado em Química, 2018.

[Orientação: Rosado, M. T. S.]

3. Francisco José Parente Mesquita de Sousa, *Síntese de Ligandos Quirais para Reações Assimétricas de Henry e de Alquilação de Aldeídos*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Murtinho, D.]

4. Juliana Gonçalves Araújo, *Complexos de Cobre Derivados do Imidazole: Síntese e Avaliação da Atividade Antitumoral*, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Murtinho, D.; Co-orientação: Pires, A. S.]

5. Bruna Cecília Suzano dos Santos, *Desenvolvimento da Polimerização do  $\beta$ -Pineno por Processos Industrializáveis*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Murtinho, D.; Co-orientação: Serra, A. C.]

6. Vanessa Raquel Gonçalves Cacho, *Ligandos Quirais Derivados de Aminoácidos para Aplicação em Catálise Assimétrica*, Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Serra, E.]

7. Márcia Alexandra de Campos Aguiar, *Synthesis, Photophysical characterization and Biological Evaluation of Promising Theranostic Agents for Cancer*, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Laranjo, M.; Co-orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D.]

8. Cláudia Daniela da Cruz Alves, *Asymmetric Neber Reaction in the Synthesis of 2-(Tetrazol-5-yl)-2H-Azirines*, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D.; Co-orientação: Cardoso, A. L.]



9. João Carlos Simões, *A New Generation of Ring-fused Fluorinated Chlorins as Promising PDT Agents*, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2018.  
[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D.; Co-orientação: Pereira, N. A. M.]
10. Margarida Inês Madeira Esteves, *Síntese de Espiro- $\gamma$ -Lactamas Quirais Derivadas da L-Cisteína*, Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2018.  
[Orientação: Pinho e Melo, T. M. V. D.; Co-orientação: Soares, M. I.]
11. Maria Cristiana das Neves, *Desenvolvimento e validação de um método analítico para a quantificação do método de dissolução em supositórios contendo ibuprofeno*, Laboratórios BASI (Mortágua).  
[Orientação: Pereira, J. C.; Moreno, M. J.]
12. Maria José Machado Sagres Guerra, *Forecasting of Airborne pollutants with ARIMA models*, Spacelayer.  
[Orientação: Pereira, J. C.; Caridade, P. J.]
13. Mafalda Daniela Leite Teixeira, *Controlo Químico da Qualidade de Tintas*, Tintas CIN.  
[Orientação: Pereira, J. C.; Antunes, F.]
14. Marco José Lemos Ferreira, *Xerogéis de sílica funcionalizados como adsorventes não seletivos de metais pesados*, Mestrado Integrado em Engenharia Química, Universidade de Coimbra, 2018.  
[Orientação: Durães, L.; Valente, A. J. M.]
15. Gianluca Utzeri, *Desenvolvimento de biogéis de pectina e quitosano para a sorção de Cymoxanil*, Mestrado em Química, Especialização em Controlo de Qualidade de Ambiente, Universidade de Coimbra, 2018.  
[Orientação: Valente, A. J. M.]
16. Joana Margarida Maia Teigão, *Validação de métodos analíticos*, Mestrado em Química, Área de especialização em Controlo de Qualidade e Ambiente, Departamento de Química, Faculdade de Ciências, Universidade de Coimbra, 2018.  
[Orientação: Ribeiro, A. C. F.]
17. Maria José Machado Sarges Guerra, "Forecasting of Airborne pollutants with ARIMA models", Departamento de Química, Universidade de Coimbra, 2018.  
[Orientador: Caridade, P. J. S. B.]
18. Cristiana Lages Pires, *Avaliação da velocidade de permeação de fármacos em sistema modelo de membranas e modelos celulares*, Tese de Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2018.  
[Orientação: Moreno, M. J.]
19. Daniel J. F. Santos, *Estudo de novos agentes anti-Influenza através de interação proteína-ligando*, Licenciatura em Bioquímica, Universidade de Coimbra, 2018.  
[Orientação: Brito, R. M. M.]

20. Joana Cunha, *Estudos em sistemas modelo para caracterizar o mecanismo envolvido no aumento de permeabilidade induzido por ondas foto-acústicas*, Tese de Mestrado em Química, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Moreno, M. J.]

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

1. Amílcar D. Prata, *Estudo Fotofísico Preliminar de Porfirinas e Mataloporfirinas e Utilização de Mataloftalocianinas como Materiais para Limitação Ótica*, Licenciatura em Química, 2018.

[Orientação: Serpa, C.]

2. Márcia F. G. Rodrigues, *Perfil de libertação de formulações tópicas de hexilresorcinol*, Licenciatura em Química Medicinal, 2018.

[Orientação: Serpa, C.]

3. Rúben Quintã, *“Fluorescência intrínseca permite o rastreio de fármacos anti-amilóide”*, Licenciatura em Química Medicinal, 2018.

[Orientação: Serpa, C.; Jesus, C. S. H.]

4. Maria Fernanda Vieira, *Comparação da eficácia in vitro de dois lotes de redapofin produzidos por procedimentos de síntese distintos*, Licenciatura em Química Medicinal, 2018.

[Orientação: Arnaut, L. G.]

5. Bárbara Lima, *Caracterização de um novo fotossensibilizador em células de melanoma: O impacto dos copolímeros de Pluronic como veículo de administração*, Licenciatura em Química Medicinal, 2018.

[Orientação: Arnaut, L. G.]

6. Adriana Margarida Duarte e Silva, *Co-cristais farmacêuticos de diflunisal: investigação de novas formas sólidas com prolina e com isoniazida*, Licenciatura em Química, 2018.

[Orientação: Eusébio, M. E. S.]

7. Ariana Coelho Ferreira dos Santos, *Co-cristais multifuncionais de um anti-anémico*, Licenciatura em Química Medicinal, 2018.

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

8. Jessica Pastilha Santos, *Investigação da formação de mesofases em compostos orgânicos: isómeros de 1,2-diclorociclo-hexano e derivados de 4-ciano-3-fluorofenil benzoato*, Licenciatura em Química, 2018.

[Orientação: Maria, T. M. R.]

9. João Miguel Tavares Rodrigues Pais, *Ácido Hialurónico na Radioterapia do Cancro da Próstata*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, 2018.

[Orientação: Canotilho, J.]

10. Ana Isabel Oliveira Garcia, *Tatuagens Inteligentes. Uma nova forma de biossensores*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, 2018.

[Orientação: Canotilho, J.]

11. André Filipe Cabral Monteiro, *Dressing Materials in Exudate Management*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, 2018.

[Orientação: Canotilho, J.]

12. Tatiana Cristina Costa Martins, *Técnica Inalatória: Boas Práticas no Tratamento da Asma e DPOC*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, 2018.

[Orientação: Castro, R. A. E.]

13. Ana Rita Abreu, *Papel da Vitamina D na Performance Cognitiva*, Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, 2018.

[Orientação: Castro, R. A. E.]

14. Luis António Neto Braga, *Desenvolvimento de Radiofármacos na Universidade de Coimbra* Mestrado Integrado em Ciências Farmacêuticas, 2018.

[Orientação: Castro, R. A. E.]

15. Andreia Cristina da Silva Gonzalez, *Síntese de Metaloporfirinas Fluoradas e sua Avaliação Catalítica em Reações de Adição de CO<sub>2</sub> a Epóxidos*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2016.

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

16. Cristina Gadelho, *Síntese de ligandos quirais para reações de alquilação enantiosseletiva*, Estágio da Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Murtinho, D.]

17. Tiago Ferreira Machado, *Síntese de Novos Ligandos Quirais Derivados do Ácido (R)-(-)-10-Canforsulfónico para Alquilação Enantiosseletiva de Benzaldeído*, Estágio da Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Murtinho, D.]

18. João Santos, *Novos Esteroides Hexacíclicos Quirais via Condensação Catalisada de  $\beta$ -Acetil-5,16-acetil-5,16-Pregnadien-20-tosilimina com Compostos Carbonílicos*, Estágio da Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2018.

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

19. Emma Louise Sterling, *Synthesis of salen-type ligands for the asymmetric hydrosilylation of acetophenone*, Estágio IAESTE, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Serra, E.]

20. Diogo Pereira, *Inversão de carga em polielectrólitos, sua relevância na compactação e condensação de ácidos nucleicos*, Estágio Científico do 1º ano do Mestrado em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Pais A. A. C. C.]

21. Miroslava Kovach, *Interação entre polielectrólitos e superfícies com o mesmo tipo de carga mediada por polielectrólitos de carga oposta*, Estágio Científico da Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Pais A. A. C. C.]

22. Diana da Costa Dias, *Coeficientes de difusão mútua do pesticida glufosinato de amónio em soluções aquosas*, Licenciatura em Química, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Ribeiro, A. C. F., Valente, A. J. M.]

23. Ana Rita Rolo Ferreira, *Estudo da difusão mútua em soluções aquosas de hialuronato de sódio*, Licenciatura em Química, Química, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Ribeiro, A. C. F.]

24. Carla Sofia Duarte Cunha, *Síntese, Estudo Espectroscópico e Fotofísico de derivados do indigo disubstituídos*, Disciplina de Estágio de Licenciatura/laboratorial, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Seixas de Melo, J. S.]

25. Ana Raquel Cassapo Pereira, *Estágio Laboratorial no Serviço de Patologia Clínica do IPOCFG*, Licenciatura em Bioquímica, Universidade de Coimbra, 2018.

[Co-orientação: Castro, M.M.]

26. Diogo José Carvalho Roque, *Interação de clorpromazina com membranas biológicas*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Moreno, M. J.]

27. Eva Bernardino, *Caracterização dos lípidos membranares e das membranas das células High Five*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Moreno, M. J.]

28. Nisa Magalhães, *Estudo do comportamento de moléculas anfifílicas em membranas por dinâmica molecular*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Loura, L. M. S.]

29. Inês Duarte Queijo, *Divulgação da Ciência - Divertir e aprender com Ciência*, Licenciatura em Bioquímica, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Castro, M. M.]

30. Tânia Gaspar, *Estudo do comportamento de moléculas anfifílicas em membranas por dinâmica molecular*, Licenciatura em Química Medicinal, Universidade de Coimbra, 2018.

[Orientação: Loura, L. M. S.]

## PROTÓTIPOS LABORATORIAIS

### SOFTWARE

1. Caridade, P. J. S. B., Varandas, A. J. C., *Dynamics with CBS: Coupling electronic structure dynamics*, 2018, GPL license.

2. Caridade, P. J. S. B., Rocha, C. M., Varandas, A. J. C., CHIPR PES: Toolbox for fitting potential energy surface, 2018, GPL license.

### PATENTES

1. *Method and system for remote issue of warnings for a patient taking an antibiotic*, PT patent application no. 20181000027294. Inventores: H. T. Soares, A. C. S. Lobo, A. D. Silva, L. G. Arnaut Moreira.

Requerente: University of Coimbra. Pedido de patente nº 20181000027294, em Portugal.

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

Patente nº 2017/06642. Data de concessão na África do Sul: 16/11/2018.

3. *Novel Spiro-lactam compounds, Process and Uses Thereof*, Pub. No.: WO/2018/207165; Pedido de Patente Internacional No.: PCT/IB2018/053357; Data de Publicação: 15.11.2018; IFD: 14.05.2018; Tipo de Publicação: A1. Inventores: Pinho e Melo, T. M. V. D., Santos, B. S., Bártolo, I., Pignatelli, R. M. P., Taveira, N. E. M. S. C..

Requerentes: Universidade de Coimbra; Faculdade de Farmácia da Universidade de Lisboa; Egas Moniz-Cooperativa de Ensino Superior; Instituto de Medicina Molecular.

4. *(3S)-and(3R)-6,7-Bis(hydroxymethyl)-1H,3H-Pyrrolo[1,2-c]thiazoles as P53 Activators*. Pedido Provisório de Patente nº110795 (25/06/2018, PORTUGUESA). Inventores: Saraiva, L. H. A., Soares, J. O. G., Pinho e Melo, T. M. V. D., Soares, M. I. L., Rocha, H. I. N. R.

Requerentes: Universidade de Coimbra; Universidade do Porto.