

<p>Licenciatura em Química</p> <p>TEMAS E RESUMOS DE PROJECTO</p> <p>Ano lectivo de 2007/2008</p>
--

Nº	TEMAS DE PROJECTO	Orientador	Área	Nº alunos	Obs.
1	A medição do pH de soluções aquosas	A. Barros	QA	1	
2	<p>Caracterização química do gel ultrasons usado em técnicas médicas de diagnóstico</p> <p>1. Aplicação de métodos de separação físicos e/ou químicos a matrizes gelificadas.</p> <p>2. Identificação e quantificação dos principais constituintes do gel ultrasons por aplicação de técnicas espectroscópicas e/ou cromatográficas.</p> <p>3. Desenvolvimento de uma proposta de preparação de um gel ultrasons.</p>	C. Moura	QA	1	
3	Permeabilidade de monocamadas	A. F. Silva	QA	1	
4	<p>a) Aplicações analíticas da impressão molecular O projecto inclui: 1) Revisão bibliográfica exaustiva sobre o tema; 2) Extração em fase sólida com solventes comerciais de impressão molecular e 3) Preparação de polímeros de impressão molecular e sua aplicação como sorvente de extração em fase sólida.</p> <p>b) Cromatografia gasosa com detecção por espectrometria de massa Princípios e procedimentos de operação, optimização e manutenção de um instrumento de cromatografia gasosa com detector por espectrometria de massa, com especial ênfase nos parâmetros relacionados com a espectrometria de massa.</p>	M. Azenha	QA	2	
5	<p>a) Sensores electroquímicos baseados em eléctrodos modificados com nanopartículas O desenvolvimento de sensores requer cada vez mais o aperfeiçoamento dos processos de modificação das superfícies sensores, recorrendo a novos materiais. Com este projecto pretende-se avaliar o comportamento de sensores electroquímicos modificados com nanopartículas metálicas ou semi-condutoras.</p> <p>b) Estudo da interacção entre nanopartículas e superfícies metálicas A possibilidade de desenvolvimento de novos materiais, baseados na interacção de nanopartículas com materiais tradicionais (metais, polímeros, produtos naturais) está fortemente condicionado pela estabilidade e propriedades dos filmes formados. Com este projecto pretende-se estudar diferentes métodos de deposição de nanopartículas em superfícies metálicas, bem como algumas das suas propriedades.</p>	C. Pereira	QA	2	

6	<p>a) Desenvolvimento de sistemas de extracção baseados em membranas hidrofóbicas para a extracção e análise de aldeídos em alimentos. Neste trabalho pretende-se avaliar as potencialidades do uso de membranas hidrofóbicas para a preparação expedita de amostras. Esses processos de extracção serão englobados em metodologias analíticas para determinação de acetaldeído em bebidas alcoólicas. A metodologia de análise envolverá uma reacção prévia de derivatização do aldeído com a dinitrofenilhidrazina e a posterior análise por cromatografia líquida (HPLC).</p> <p>b) Determinação de alfa-cetoácidos em bebidas alcoólicas por HPLC Neste trabalho pretende-se estudar a problemática da determinação de alfa-cetoácidos em bebidas alcoólicas e a sua importância no contexto da qualidade alimentar. Neste âmbito serão desenvolvidos estudos de optimização de uma metodologia analítica baseada na extracção por SPE (separação de fase sólida) e reacção prévia de derivatização com o-fenilenodiamina em meio ácido. A posterior análise será realizada por cromatografia líquida (HPLC).</p>	J. A. M. Rodrigues	QA	2	
7	<p>Importância dos aditivos nos materiais geossintéticos Neste projecto, pretende-se monitorizar os aditivos existentes em materiais geossintéticos ao longo de diferentes processos de degradação. Para tal, geotextêis e georredes, constituídos por diferentes polímeros e estabilizados com diferentes aditivos, serão sujeitos a degradação, por exemplo, por termoxidação e por acção da radiação ultravioleta, e proceder-se-á à determinação dos aditivos, ao fim de diferentes períodos.</p>	P. Almeida	QA	1	
8	<p>Uso do pvpp para a extracção de compostos fenólicos do lúpulo O trabalho a realizar tem como objectivo principal a extracção e caracterização dos compostos fenólicos do lúpulo (<i>Humulus lupulus L.</i>). Para tal será implementada uma nova metodologia que consiste na utilização do PVPP (polivinilpolipirrolidona) para a extracção dos compostos fenólicos e posteriormente sua análise e caracterização por cromatografia líquida de alta eficiência com detecção espectrofotométrica e por espectrometria de massa. Além das técnicas cromatográficas referidas, o aluno irá utilizar diversos métodos tais como: métodos "Folin-Ciocalteu", Bendelow e EBC" para a determinação dos polifenóis totais; método DPPH para a determinação da capacidade antioxidante; método ITT para a determinação do poder redutor.</p>	L. Guido	QA	1	
9	<p>Energética da Respiração, em Condições Aeróbicas e Anaeróbica O estudo tem por objectivo a determinação da energia associada ao processo de degradação da glicose, em condições aeróbicas e anaeróbicas. Para o efeito determinam-se, por calorimetria de combustão, os</p>	L. Ferrão	QF	2	Grupo prévio

	valores da energia de combustão da glicose e etanol.				
10	<p>Estudo termodinâmico do equilíbrio tautomérico de compostos termocrómicos</p> <p>Efeitos na cor de diversas espécies podem ser induzidos por exposição a luz ultravioleta ou pela temperatura. Propomo-nos implementar condições, desenvolver procedimentos e fazer um estudo termodinâmico da influência da temperatura no equilíbrio estabelecido entre os tautómeros resultantes de um spiropirano (1,3,3-trimetilindoline-2-spiro-6'-(2',3'-β-naftopirano)).</p> <p>A eventual dificuldade de aquisição comercial das amostras poderá implicar que seja necessário proceder à síntese e caracterização das mesmas. O estudo do efeito termocrómico será efectuado por espectrofotometria de UV/Vis, sendo os resultados usados para a determinação de alguns parâmetros termodinâmicos.</p> <p>Prevê-se que a caracterização do comportamento térmico dos compostos poderá ainda ser efectuada por DSC.</p> <p>Este tema enquadra-se num contexto mais lato do estudo energético de derivados do naftalenaldeído, a desenvolver em paralelo com este estudo ou numa fase imediatamente posterior.</p>	M.D. Ribeiro da Silva e L. Belchior	QF	2	Grupo prévio
11	<p>Determinação laboratorial de pressões de vapor de líquidos puros a diferentes temperaturas.</p> <p>Pretende-se avaliar as vantagens da substituição do tradicional manómetro de mercúrio por um isotenescópio contendo água pura para a medição da pressão aplicada a um ebuliómetro de Ramsay-Young. Após a realização de testes com água, serão determinadas as pressões de vapor, a diferentes temperaturas, de três alcoóis (etanol, propanol e butanol).</p>	M. J. Monte	QF	3	Grupo prévio
12	<p>Ensaio e teste de um ebuliómetro para medição de volatilidade de líquidos com impacto ambiental.</p> <p>A volatilidade de compostos orgânicos, em especial os que são usados como solventes a nível industrial e é uma das propriedades fundamentais na modelação e avaliação dos riscos ambientais. Os valores de pressões de vapor e sua dependência com a temperatura, são usados neste sentido, para quantificar e modelar o transporte de poluentes em fase gasosa e, desta forma, avaliar o seu risco. Este projecto é orientado para 2 alunos que farão em alguns casos tarefas independentes e que terá como principal objectivo o ensaio e teste de um ebuliómetro para medição de volatilidade de solventes voláteis comuns. Este projecto está subdividido nas seguintes Tarefas principais:</p> <p>T1 – Montagem do ebuliómetro; T2 – Calibração do sensor de temperatura; T3 – Calibração do sensor de pressão; T4 – Ensaio e optimização do sistema de vácuo e controlo de pressão; T5 – Medição de pressões de vapor a diferentes</p>	L. Belchior	QF	2	Grupo prévio

	<p>temperaturas de líquidos de referência; T6 – Desenho do instrumento e periféricos; T7 – Elaboração de manual de utilização; T8 – Desenho de página WWW para apresentação e divulgação do instrumento.</p>				
13	<p>Montagem e teste de um DSC (calorímetro diferencial de varrimento). A <u>Termoanálise</u>, particularmente, a calorimetria diferencial de varrimento (DSC), é considerada actualmente como uma das técnicas essenciais para a caracterização de materiais. Esta técnica é muito usada na caracterização de polímeros para a avaliar o comportamento térmico e como forma de inferir características estruturais. Na indústria farmacêutica é uma peça fundamental para a avaliação e caracterização das diferentes formas polimórficas dos compostos. Este projecto é orientado para 2 alunos que farão em alguns casos tarefas independentes e que terá como principal objectivo o ensaio e teste de DSC simples para medir capacidades caloríficas e estudo de processos de transição de fase. Este projecto está subdividido nas seguintes tarefas principais: T1 – Montagem do DSC; T2 – Calibração do sistema de medição de temperatura; T3 – Desenvolvimento e configuração de sistema de aquisição de dados; T4 – Teste de sensibilidade do sistema calorimétrico; T5 – Teste com compostos de referência; T6 – Desenho do instrumento e periféricos; T7 – Elaboração de manual de utilização; T8 – Desenho de página WWW para apresentação e divulgação do instrumento.</p>	L. Belchior	QF	2	Grupo prévio
14	<p>Optimização de processos para determinação de bifenilos policlorados (PCBs) em sedimentos estuarinos: a) Processos de extracção b) Processos de determinação</p> <p>Os objectivos do projecto visam a complementação da formação por desenvolvimento de capacidade de realização de trabalho e adaptação a situações novas. A monitorização da contaminação de sedimentos por substâncias hidrofóbicas tóxicas é objecto actual de investigação sendo imprescindível o desenvolvimento e optimização de processos de extracção e determinação fiáveis e expeditos. O trabalho a desenvolver sob o tema proposto constituirá uma introdução à utilização de técnicas de extracção de analitos numa matriz sólida e microextracção para fase sólida acoplada a cromatografia gasosa, com diferentes tipos de detecção, para detecção e quantificação das referidas substâncias prioritárias.</p>	M. Clara Basto	QI	2	Grupo prévio

15	<p>Preparação e caracterização de nanopartículas metálicas para aplicações biológicas</p> <p>a) Nanopartículas de ouro b) Nanopartículas de prata c) Nanopartículas mistas de ouro e prata</p> <p>O projecto consiste na utilização de diferentes métodos de preparação para obter nanopartículas de ouro, prata e mistas de ouro e prata. Comparar-se-ão as características morfológicas (microscopia electrónica de transmissão e microscopia de força atómica) das várias nanopartículas preparadas, bem como as suas propriedades ópticas de modo a otimizar os métodos de preparação. As nanopartículas serão funcionalizadas com moléculas bifuncionais capazes de estabelecer ligações com proteínas ou com oligonucleótidos e a estabilidade e características destas partículas serão estudadas de modo a otimizar a sua utilização como sondas de moléculas biológicas.</p>	E. Pereira	QI	3	
16	<p>a) Titulações viscosimétricas de derivados da quitina b) Métodos de caracterização de derivados da quitina c) Métodos de síntese de carboximetil-quitosanos</p> <p>Este projecto tem como objectivo sintetizar e caracterizar um derivado do quitosano, o carboximetilquitosano. Em paralelo pretende-se estudar as propriedades viscosimétricas e potenciométricas dos complexos metálicos do quitosano e alguns dos seus derivados."</p>	C. Gomes	QI	3	Grupo prévio
17	<p>Funcionalização de materiais nanoestruturados</p> <p>a) Materiais de carbono nanoestruturados b) Nanoargilas c) Nanopartículas de sílica</p> <p>Neste projecto pretende-se funcionalizar materiais de carbono nanoestruturado (nanotubos, xerogels e réplicas de sílica), nanoargilas e nanopartículas de sílica para reacção com compostos inorgânicos que apresentam diferentes propriedades (catalíticas ou reconhecimento químico) ou com materiais têxteis.</p>	A. C. Freire	QI	3	
18	<p>Síntese de tensioactivos biocompatíveis derivados da lisina com cadeias alquílicas assimétricas.</p> <p>O projecto consta da síntese de tensioactivos aniónicos derivados da lisina por condensação com ácidos gordos naturais cujas cadeias alquílicas possuam um número diferente de grupos metileno (C8 a C16).</p> <p>A síntese dos tensioactivos engloba vários passos reaccionais. Em primeiro lugar, faz-se reagir o lisinato de metilo, protegido no seu grupo amino da cadeia lateral com o grupo benziloxycarbonilo, com um ácido gordo natural, na presença de um agente acoplante (TBTU) e de uma base (DIEA). Em seguida, efectua-se a desprotecção do grupo amino por hidrogenação catalítica. Efectua-se então a introdução, no grupo amino livre, da segunda cadeia alquílica, por reacção com um ácido gordo natural diferente do primeiro. Por último, procede-se à saponificação do éster metílico com solução aquosa de hidróxido de sódio ou de potássio.</p>	M. J. Araújo	QO	3	Grupo prévio

	<p>O decurso de todas as reacções será acompanhado recorrendo à técnica de cromatografia em camada fina e todos os intermediários e produtos serão caracterizados estruturalmente, através das técnicas de espectrometria de massa, ressonância magnética nuclear e análise elementar.</p>				
19	<p>a) Síntese de Metabolitos do Hidroxitirosol O consumo de azeite virgem tem vindo a ser associado a uma baixa incidência de doenças cardiovasculares e de certos cancros. O azeite virgem contém uma grande variedade de compostos fenólicos como o hidroxitirosol, o tirosol e secoiridóides, dos quais os mais importantes se realçam a oleuropeína e as suas agliconas. As propriedades biológicas destes compostos irão depender da extensão da sua absorção e metabolização. Estudos de biodisponibilidade em animais e humanos demonstraram que o hidroxitirosol é absorvido e, juntamente com os seus metabolitos, pode ser encontrado no plasma sanguíneo. Os mesmos estudos efectuados com a oleuropeína, no entanto, demonstraram que este polifenol não é absorvido mas que é hidrolisado no intestino libertando hidroxitirosol. Deste modo o objectivo deste trabalho é sintetizar metabolitos do hidroxitirosol para posteriormente poder ser testada, em vários bioensaios, a sua actividade anti-aterosclerótica. Para a realização deste trabalho serão utilizadas técnicas de HPLC e HPLC-MS, cromatografia em coluna e RMN entre outras.</p> <p>b) Identificação dos constituintes de um biodiesel e lubrificante O objectivo deste trabalho é identificar e quantificar os constituintes de uma mistura lubrificante utilizada na indústria automóvel. As várias fracções oleosas do lubrificante serão separadas por cromatografia em coluna e serão analisadas num primeiro passo por Espectrofotometria de Infra-Vermelho. Serão preparados ésteres metílicos dos ácidos gordos por trans-esterificação e estes serão analisados por cromatografia em fase gasosa. A parte derivada dos álcoois dos ésteres presentes na mistura será analisada por HPLC após derivatização. A confirmação da identidade dos vários constituintes será efectuada por EM e/ou RMN.</p>	M. F. Martins	QO	2	

20	<p>Tensioactivos catiónicos derivados de amino ácidos como potenciais veiculadores de fármacos: Contribuição à sua síntese.</p> <p>Pretende-se sintetizar tensioactivos do tipo gemini derivados da serina. A síntese envolve os seguintes passos:</p> <ul style="list-style-type: none"> -Aminação reductiva de aldeídos “gordos” (C14, C16 e C18, obtidos por oxidação prévia dos correspondentes álcoois) com o serinato de metilo. -Introdução do espaçador: Aminação reductiva do gliceraldeído. -Metilação com iodometano. -Remoção do grupo protector usando CF_3COOH. <p>Os produtos obtidos em cada etapa serão purificados, recorrendo a técnicas usuais em QO, e identificados por métodos espectroscópicos.</p>	L. C. Vale	QO	2	
21	<p>a) Síntese de corantes derivados de antocianinas e vinilcatequinas com potencial aplicações na indústria alimentar.</p> <p>As antocianinas são pigmentos vermelhos naturais presentes numa enorme variedade de alimentos de origem vegetal (uvas, mirtilos, cereja, couve roxa, etc.) e derivados tais como bebidas (vinho e sumos de frutas). Nos alimentos, estes compostos sofrem reacções químicas originando outros tipos de pigmentos como p. ex. a piranoantocianinas que têm uma cor alaranjada e que estão ainda pouco estudados. Neste projecto pretende-se sintetizar várias piranoantocianinas e estudar a suas características cromáticas e de estabilidade, tendo em vista a sua aplicação como corantes alaranjados na indústria alimentar.</p> <p>b) Estudo dos compostos fenólicos presentes na cortiça e sua incidência na qualidade do vinho.</p> <p>A cortiça é um produto natural, de grande valor económico para o nosso país, com um grande potencial de utilização em vários sectores da indústria e nomeadamente na indústria alimentar na produção de rolhas para o vinho. A cortiça, apresenta uma enorme complexidade estrutural de compostos orgânicos: polímeros de elevado peso molecular (suberina, lenhina, polissacáridos) e composto de baixo peso molecular (p.ex. polifenóis). Estes compostos, sobretudo os de baixo peso molecular, são passíveis de serem extraídos da rolha para as bebidas podendo alterar as suas características organolépticas (cor e sabor). Neste trabalho pretende-se isolar os compostos fenólicos de baixo peso molecular e proceder à sua caracterização estrutural.</p>	V. Freitas	QO	2	

22	<p>a) Estudo de vinhos do Porto elaborados a partir de vinhas velhas e vinhas novas Pretende-se acompanhar a evolução de vinhos do Porto produzidos a partir de vinhas velhas e novas e compará-los em termos físico-químicos. Será dada especial atenção à composição qualitativa e quantitativa em termos de compostos polifenólicos, assim como em termos de propriedades sensoriais. As principais técnicas deste trabalho envolvem cromatografia em coluna, métodos espectrofotométricos e HPLC.</p> <p>b) Estudo comparativo da caracterização polifenólica de vinhos do Douro de mesa e Porto. Pretende-se acompanhar a evolução de vinhos do Porto e de mesa produzidos a partir de uvas da Região Demarcada do Douro. Será dada especial atenção à composição qualitativa e quantitativa em termos de compostos polifenólicos, assim como em termos de propriedades sensoriais. Poderá eventualmente avaliar-se algumas propriedades antioxidantes dos vinhos em estudo. As principais técnicas deste trabalho envolvem cromatografia em coluna, métodos espectrofotométricos e HPLC.</p>	N. Mateus	QO	2	
23	<p>Estudo computacional de a) centros metálicos proteicos b) centros activos metálicos c) de metaloproteínas</p> <p>Neste projecto visa avaliar-se a performance de métodos computacionais na previsão de propriedades estruturais de importantes compostos bioinorgânicos, nomeadamente complexos de zinco, cobre e ferro. As propriedades que serão calculadas computacionalmente serão tanto geométricas como energéticas.</p>	J. A. F. Gomes e M. J. Ramos e P. Fernandes	QT	3	
24	<p>Comparação entre propriedades termodinâmicas teóricas experimentais obtidas nas bases de dados do National Institute of Standards and Technology (NIST)</p> <p>Neste projecto, pretende-se construir uma base de dados contendo comparações sistemáticas de propriedades termodinâmicas experimentais e teóricas num intervalo alargado de temperaturas maiores ou iguais que 298,15 K. Para este efeito, serão consideradas espécies químicas gasosas de pequena dimensão e reacções químicas envolvendo estas espécies.</p> <p>Os dados experimentais podem ser facilmente obtidos na base de dados NIST Chemistry WebBook, onde existem disponíveis para intervalos de temperaturas do tipo atrás referido.</p> <p>Os dados teóricos serão obtidos utilizando uma aplicação desenvolvida na ferramenta Microsoft Excel, que permite calcular propriedades termodinâmicas a qualquer temperatura para espécies e reacções químicas em fase gasosa. Para o efeito, recorre-se à Mecânica Estatística na sua formulação quântica. Este formalismo permite calcular as propriedades referidas,</p>	M. N. Cordeiro e A. Melo	QT	2	Grupo prévio

	recorrendo a um número limitado de constantes moleculares disponíveis na base Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase.				
25	<p>Aplicação de técnicas de modelação molecular na caracterização de complexos de calix[2]furano[2]pirrol com catiões metálicos</p> <p>A grande diversidade de aplicações dos calix[4]pirrolos e seus derivados tem tornado estas moléculas objecto de várias pesquisas durante os últimos anos. Contudo, há ainda muitas questões que continuam sem resposta. Pretende-se com este trabalho perceber o comportamento estrutural e químico do calix[2]furano[2]pirrol, um composto derivado do calix[4]pirrol, e, em particular, avaliar o seu potencial para formar complexos com diferentes iões metálicos. O aluno terá a oportunidade de trabalhar com software específico de tratamento e análise de resultados quânticos como por exemplo o GaussView4.0.</p>	A. Magalhães	QT	1	

INFORMAÇÃO ADICIONAL

O Projecto é uma unidade curricular de índole experimental. No presente ano lectivo, o trabalho a desenvolver pelos alunos nesta unidade curricular poderá ser realizado individualmente ou em grupos de 2 ou 3 alunos.

O processo de escolha dos temas de Projecto realiza-se em várias etapas:

- 1 A cada aluno será atribuída uma classificação obtida com base na média das notas das disciplinas realizadas no curso pré-Bolonha, a média das unidades curriculares realizadas no curso adequado a Bolonha durante o 1º semestre e as unidades curriculares que faltam para completar a Lic. em Química adequada a Bolonha, de acordo com um algoritmo que será disponibilizado brevemente na [página web](#) da Lic. em Química.
- 2 Os Projectos realizados em grupos de 2 ou 3 alunos **podem exigir a formação prévia do grupo**. Esta questão prende-se com a necessidade de compatibilização dos horários dos alunos que escolhem esse tema, uma vez que terão de desenvolver o Projecto num mesmo horário, a acordar com o docente responsável. Para a seriação final dos alunos, considera-se a classificação do grupo, que corresponde à média das classificações individuais de cada aluno. Os Projectos que apresentam este requisito aparecem assinalados na lista de temas como **Grupo prévio**.
- 3 Nos Projectos que **não exigem a formação de Grupo Prévio**, não há necessidade de compatibilização dos horários dos alunos e por conseguinte o grupo poder-se-á formar previamente ou durante o processo de escolha dos temas. Para a seriação final, considera-se a classificação do grupo (caso tenha sido formado previamente) ou individual do aluno.
- 4 Os alunos/grupos devem fazer 3 opções de escolha e indicá-las no formulário que será fornecido.
- 5 Os alunos/grupos serão seriados por ordem decrescente das suas classificações e a escolha dos temas será iniciada pelo aluno/grupo com classificação mais elevada.

Porto, 11 de Fevereiro de 2008

Ana Cristina Freire

P'la Comissão da Licenciatura em Química