

Licenciatura em Química
TEMAS E RESUMOS DE PROJECTO
Ano Lectivo 2008 / 2009

Nº	Temas de Projecto	Orientador	Área	Nº alunos
1	<p>Estudo Analítico de Aromas em Materiais Têxteis Neste trabalho pretende-se extrair aromas de material têxtil e, de seguida, quantificar os compostos relacionados com esses aromas. A técnica de extracção a utilizar será o "head-space" e a determinação será feita por cromatografia gasosa com detector de ionização de chama. Para a identificação dos compostos, poder-se-á recorrer à cromatografia gasosa com detector de massa.</p>	C. Moura P. Almeida	QA	3
2	<p>Desenvolvimento de novos métodos de síntese de nanopartículas utilizando líquidos iónicos e sua aplicação analítica</p>	A. F. Silva C. Pereira	QA	3
3	<p>Desenvolvimento e validação de metodologias analíticas para o controlo de qualidade de alimentos. Neste trabalho pretende-se desenvolver e validar metodologias analíticas para o controlo analítico da qualidade de alimentos. O processo analítico envolverá a optimização das estratégias de amostragem, de preparação da amostra, de medição instrumental e de tratamento e interpretação de resultados. O trabalho a desenvolver envolverá o recurso ao uso de técnicas de preparação de amostras – extracções assistidas por membranas, extracção de fase sólida e outras – e a utilização de equipamentos analíticos - cromatografia líquida (HPLC) e voltametria.</p>	A. Barros J. A. Rodrigues	QA	3
4	<p>Estudo da micelização de tensoactivos iónicos em solução aquosa, por espectrofotometria UV-vis: estudo do efeito da estrutura molecular do tensoactivo e da força iónica do meio no valor da <i>cmc</i> Os tensoactivos são compostos anfífilos que em meio aquoso se auto-associam para formar agregados moleculares (micelas), a partir de uma dada concentração molecular em solução, designada por concentração micelar crítica (<i>cmc</i>). Este parâmetro é fundamental para a caracterização de um tensoactivo e para a sua aplicabilidade prática. Os tensoactivos interagem com polímeros, em particular com polímeros hidrofobicamente modificados, formando sistemas com vasta aplicação em biociências, cosmética, preservação de alimentos e sistemas de administração de drogas. Para sua utilização e optimização, é fundamental conhecer as características da sua associação, nomeadamente a chamada concentração de associação crítica, (<i>cac</i>) e as suas isotérmicas de associação. A determinação da <i>cmc</i> de tensoactivos iónicos em solução aquosa pode ser realizada analisando a variação do espectro UV-vis de uma sonda apropriada (benzoiacetona) introduzida nas referidas soluções, em função da concentração de tensoactivo presente. O valor da <i>cmc</i> depende, entre outros, de factores estruturais do próprio tensoactivo e ainda do meio (força iónica). Pretende-se neste projecto uma análise de alguns destes factores.</p>	M.A.Matos	QF	3

5	<p>Determinação potenciométrica de isotérmicas de ligação de tensoactivos a polímeros (eléctrodo selectivo). Avaliação do efeito de parâmetros moleculares na micelização e interacção com o polímero</p> <p>Os tensoactivos são compostos anfífilos que em meio aquoso se auto-associam para formar agregados moleculares (micelas), a partir de uma dada concentração molecular em solução, designada por concentração micelar crítica (<i>cmc</i>). Este parâmetro é fundamental para a caracterização de um tensoactivo e para a sua aplicabilidade prática. Os tensoactivos interagem com polímeros, em particular com polímeros hidrofobicamente modificados, formando sistemas com vasta aplicação em biociências, cosmética, preservação de alimentos e sistemas de administração de drogas. Para sua utilização e optimização, é fundamental conhecer as características da sua associação, nomeadamente a chamada concentração de associação crítica, (<i>cac</i>) e as suas isotérmicas de associação. Neste projecto pretende-se: (1) determinar potenciometricamente isotérmicas de associação de tensoactivos a polímeros; (2) testar 2 métodos diferentes para determinação das isotérmicas de associação de tensoactivos a polímeros; (3) avaliar os efeitos da carga na associação; (4) determinar potenciometricamente a <i>cmc</i> de tensoactivos biocompatíveis.</p>	M. Bastos	QF	3
6	<p>Estudo condutimétrico do efeito de diferentes parâmetros moleculares na micelização de tensoactivos iónicos</p> <p>Os tensoactivos são compostos anfífilos que em meio aquoso se auto-associam para formar agregados moleculares (micelas), a partir de uma dada concentração molecular em solução, designada por concentração micelar crítica (<i>cmc</i>). Este parâmetro é fundamental para a caracterização de um tensoactivo e para a sua aplicabilidade prática. Os tensoactivos interagem com polímeros, em particular com polímeros hidrofobicamente modificados, formando sistemas com vasta aplicação em biociências, cosmética, preservação de alimentos e sistemas de administração de drogas. Para sua utilização e optimização, é fundamental conhecer as características da sua associação, nomeadamente a chamada concentração de associação crítica, (<i>cac</i>) e as suas isotérmicas de associação. A condutimetria é uma técnica amplamente usada para a determinação da <i>cmc</i> de tensoactivos iónicos, permitindo ainda a determinação do grau de ionização micelar. Pretende-se com este projecto estudar o efeito na <i>cmc</i> de tensoactivos iónicos dos seguintes factores: (1) comprimento da cadeia hidrocarbonada do tensoactivo; (2) natureza do contra-ião; (3) natureza do grupo polar, (4) presença de aditivos orgânicos.</p>	E. Marques	QF	3
7	<p>Volumes molares: uma interpretação microscópica de dados macroscópicos</p> <p>O <i>volume molar</i> de um componente numa solução corresponde a uma variável termodinâmica intensiva, <i>volume parcial molar</i>, cujo valor pode diferir significativamente do correspondente <i>volume molar</i> desse componente puro. O <i>volume parcial molar</i> corresponde, assim, a um conceito muito útil na clarificação de interacções que ocorrem em soluções aquosas e não aquosas. Estudos de volumes parciais molares em electrólitos têm contribuído para o esclarecimento das interacções ião-solvente, ião-ião ou solvente-solvente (os volumes parciais molares de electrólitos a diluição infinita são de grande importância no estudo das interacções ião-solvente, atendendo a que nessas condições as interacções ião-ião podem ser desprezadas). Este projecto tem por finalidade a determinação de volumes parciais dos componentes de diversas soluções aquosas, em diferentes concentrações, a partir da medição das respectivas densidades. Complementarmente, propõe-se o estudo da dependência, com a temperatura, dos volumes parciais molares em vários electrólitos.</p>	M. D. Ribeiro da Silva	QF	3

8	<p>Como desenvolver um Projecto (em Química Física)</p> <p>De acordo com os objectivos desta unidade curricular, será proposto aos alunos que identifiquem um problema/tema que pretendam estudar do ponto de vista da Química Física, tendo presente as limitações impostas pela duração do Projecto e pela instrumentação disponível no laboratório. Serão privilegiados temas nas áreas de termodinâmica, cinética e electroquímica.</p> <p>Este projecto destina-se a três alunos. Pretende-se que tanto quanto possível a temática seja comum mas que permita a realização de tarefas individuais diferenciadas.</p> <p>Os alunos começarão por fazer uma recolha bibliográfica, terão de apresentar os objectivos do trabalho e propor a metodologia que pretendem seguir. Deverão ainda estabelecer um cronograma para as diversas tarefas a realizar.</p>	J. Gonçalves	QF	3
9	<p>Preparação e caracterização de filmes LbL e nanomateriais</p> <p>Este projecto contém duas vertentes: (i) preparação, caracterização e funcionalização de nanomateriais de sílica, carbono e nanoargilas e (ii) fabricação de filmes finos híbridos preparados pela técnica de auto-montagem layer-by-layer, usando como componentes polielectrólitos orgânicos, complexos de metais de transição e os nanomateriais de sílica, carbono e nanoargilas. Na caracterização dos diversos compostos e materiais utilizar-se-ão desde as técnicas clássicas de caracterização de compostos moleculares, às técnicas utilizadas na caracterização de filmes e nanomateriais.</p>	A. C. Freire	QI	2/3*
10	<p>Reacções de derivatização de ácidos gordos para análise por cromatografia líquida</p> <p>O conhecimento do tipo e quantidade de ácidos gordos livres nos solos é importante do ponto de vista ambiental, agrícola e forense. O método mais vulgar de análise de ácidos gordos livres é a cromatografia gasosa. No entanto, graças aos recentes avanços nas técnicas de cromatografia líquida com detecção por massa, têm sido desenvolvidas novas metodologias baseadas em cromatografia líquida com simples reacções de derivatização. Neste projecto vão-se desenvolver novas metodologias analíticas de cromatografia líquida para análise de ácidos gordos usando, por exemplo, a reacção com a feniletilamina originando ceramidas.</p>	J.E. Silva E. Borges	QI	2/3*
11	<p>Desenvolvimento de novos métodos de síntese verde de nanopartículas de ouro, prata e mistas de ouro e prata</p> <p>A crescente importância económica de produtos de nanotecnologia, nomeadamente da utilização de nanopartículas de metais nobres, leva à necessidade de desenvolvimento de novos métodos de síntese economicamente viáveis e de baixo impacto ambiental. Neste trabalho utilizar-se-ão metodologias desenvolvidas nos projectos do ano lectivo anterior para otimizar a síntese de nanopartículas de ouro, prata e mistas de ouro e prata, utilizando polímeros naturais de baixo custo e baixo impacto ambiental. Comparar-se-ão as características morfológicas (microscopia electrónica de transmissão e microscopia de força atómica), as suas propriedades ópticas e a sua estabilidade coloidal, de modo a otimizar os métodos de preparação. As nanopartículas mais promissoras serão seleccionadas para aplicação em fibras têxteis e em estudos de nanotoxicologia.</p> <p>Os alunos trabalharão individualmente mas utilizando metodologias semelhantes. Os resultados obtidos serão partilhados e discutidos em reuniões periódicas.</p>	E. Pereira	QI	2/3*

12	<p>Optimização de Processos de Determinação de Hidrocarbonetos em Sedimentos</p> <p>Diversos hidrocarbonetos, lipofílicos e carcinogénicos, são contaminantes de diversos compartimentos ambientais. A caracterização deste tipo de contaminação é presentemente uma prioridade de investigação sendo, para tal, imprescindível o desenvolvimento e optimização de processos de extracção e determinação fiáveis e expeditos.</p> <p>O trabalho a desenvolver sob o tema proposto constituirá uma introdução à utilização de técnicas de extracção de hidrocarbonetos em sedimentos, alternativas às tradicionalmente utilizadas, para posterior detecção e quantificação utilizando técnicas cromatográficas e/ou espectroscópicas.</p>	M. Clara Basto	QI	2/3*#
13	<p>Síntese de tensoactivos biocompatíveis derivados da lisina com cadeias alquílicas de tamanhos diferentes</p> <p>O projecto consta da síntese de tensoactivos aniónicos derivados da lisina por condensação com ácidos gordos naturais cujas cadeias alquílicas possuam um número diferente de grupos metileno (C8 a C16). A síntese dos tensoactivos 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 benziloxicarbonilo, com um ácido gordo natural, na presença de um agente acoplante (TBTU) e de uma base orgânica (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 cuja cadeia hidrocarbonada seja diferente da do primeiro ácido gordo introduzido. Por último, procede-se à saponificação do éster metílico com solução aquosa de hidróxido de sódio ou de potássio. 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>	M. J. Araújo	QO	2
14	<p>Tensoactivos catiónicos derivados de aminoácidos como potenciais veiculadores de fármacos: Contribuição à sua síntese</p> <p>Tensoactivos catiónicos derivados de aminoácidos como potenciais veiculadores de fármacos: Contribuição à sua síntese.</p> <p>Pretende-se sintetizar precursores de tensoactivos do tipo gemini derivados da serina, da lisina (N-protegida na cadeia lateral) e da 4-hidroxirolina. A síntese envolve os seguintes passos:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Aminoação redutiva de aldeídos "gordos" (C12, C14, C16 e C18, obtidos por oxidação prévia dos correspondentes álcoois) com os aminoácidos pretendidos. - Introdução do espaçador por aminoação redutiva do glutaraldeído com os aminoácidos N-alquilados obtidos previamente (da serina e da lisina) e com a 4-hidroxirolina. - Introdução do espaçador por reacção de condensação peptídica entre os aminoácidos N-alquilados e diaminas [H₂N-(CH₂)_n-NH₂]. - Introdução do espaçador por reacção de Williamson entre o aminoéster N-alquilado da 4-hidroxirolina e dihaloalcanos [X-(CH₂)_n-X] na presença duma base. <p>Será necessária a purificação e caracterização estrutural de todos os compostos sintetizados.</p>	M. L. Vale	QO	2

15	<p>Aplicação de metodologias de síntese em fase sólida para a preparação de péptidos com aplicação em novos biomateriais</p> <p>O trabalho proposto insere-se em projectos de investigação interdisciplinares, em colaboração com outros grupos internos ou externos ao DQFCUP. Neste contexto, os alunos irão aprender a recorrer a metodologias de síntese orgânica em fase sólida para preparar pequenos péptidos (5 a 15 aminoácidos) com potencial aplicação na concepção de biomateriais. O tipo específico de aplicação dependerá de cada família de péptidos, visando-se principalmente: a) péptidos para revestimento de nanopartículas para biossensores; b) péptidos bioactivos para aplicação em materiais para implante ósseo.</p>	P. Gomes	QO	3
16	<p>Reacção de aza-Diels-Alder entre Oximas de Glioxilatos Quirais e dienos: Contribuição à síntese de heterociclos bioactivos</p> <p>O estudo experimental das metodologias de síntese adequadas para preparar uma grande diversidade de derivados pirrolidínicos e/ou piperidínicos (<i>aza-sugars</i>) enantiomericamente puros e potencialmente anti-víricos e/ou anti-neoplásicos, a partir de aductos procedentes de reacções de aza-Diels-Alder, tem vindo a ser muito explorada nos últimos tempos. Este trabalho tem por finalidade o estudo da reacção de aza-Diels-Alder entre oximas de glioxilatos quirais e ciclopentadieno, como contributo ao desenvolvimento de novos precursores sintéticos de derivados pirrolidínicos de interesse.</p> <p>Usar-se-ão álcoois quirais derivados do 8-fenilmentol para preparar os correspondentes acrilatos quirais, os quais, por cisão oxidativa, darão origem aos glioxilatos quirais. Os glioxilatos, por reacção com a <i>N</i>-hidroxilamina, serão transformados nas correspondentes oximas quirais, as quais reagirão com ciclopentadieno para permitir obter os correspondentes cicloaductos (<i>1S-exo</i>; <i>1R-exo</i>; <i>1S-endo</i>; <i>1R-endo</i>) como diastereoisómeros susceptíveis de separação cromatográfica.</p> <p>-Técnicas experimentais: RMN (¹H e ¹³C), IR, MS e técnicas cromatográficas.</p>	E. Borges	QO	2
17	<p>Determinação de propriedades termodinâmicas de espécies químicas usando a Mecânica Estatística</p> <p>Neste projecto, pretende-se efectuar comparações sistemáticas de propriedades termodinâmicas calculadas teoricamente e determinadas experimentalmente, num intervalo alargado de temperaturas maiores ou iguais que 298,15 K. Para o efeito, serão apenas consideradas espécies químicas gasosas. Os cálculos teóricos serão realizados utilizando a formulação clássica da Mecânica Estatística analiticamente, ou recorrendo a um programa de simulação desenvolvido (método de Monte Carlo) que permite obter propriedades termodinâmicas a qualquer temperatura para espécies químicas em fase gasosa. Para ambos os casos, será necessário recorrer a um número limitado de constantes moleculares que, no entanto, se encontram disponíveis na base Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase. Por outro lado, resultados experimentais das mesmas propriedades podem ser facilmente obtidos na base de dados NIST Chemistry WebBook, onde existem disponíveis para intervalos de temperaturas do tipo atrás referido.</p>	N. Cordeiro	QT	2

18	<p>Desenvolvimento de uma base de dados de fármacos medicamente relevantes para aplicações computacionais de desenho e optimização de fármacos</p> <p>O objectivo deste projecto é o desenvolvimento de uma base de dados contendo as características físico-químicas e estruturas tridimensionais dos principais fármacos usados em terapia anti-HIV e anti-cancerígena para aplicações computacionais de desenho e optimização de fármacos. O projecto possibilita ainda a utilização de métodos quânticos na determinação de parâmetros de mecânica molecular para os diversos fármacos referidos, tornando possível a realização de estudos computacionais atomísticos da interacção fármaco-receptor.</p>	M. J. Ramos	QT	3
19	<p>Interacções moleculares</p> <p>Será feito um estudo das interacções entre átomos, iões e moléculas simples, usando leis físicas como a lei de Coulomb entre partículas carregadas e as verdadeiras interacções calculadas por métodos quânticos rigorosos. O estudante começará o projecto ao nível de um manual de Química Física (e.g. Physical Chemistry, P.W. Atkins, Capítulo "Interacções Moleculares") e fará o seu caminho no sentido do maior rigor na descrição e compreensão dos fenómenos.</p>	F. Gomes	QT	2
20	<p>Estudo estatístico de padrões em estruturas secundárias de proteínas.</p> <p>Neste trabalho far-se-á o levantamento estatístico de pares e de tripletos de aminoácidos em estruturas secundárias de proteínas. As classes de proteínas a estudar serão pré-seleccionadas de acordo com a sua relevância funcional em certas doenças. Usar-se-á a aplicação informática <i>Prot-2S</i>, desenvolvida pelo nosso grupo, e que se encontra disponível na internet. O objectivo deste trabalho é o de procurar eventuais correlações entre padrões de aminoácidos em estruturas secundárias de proteínas, como hélices α e folhas β, e a função química que elas desempenham.</p>	A. Magalhães	QT	2

* À área pedagógica de Química Inorgânica estão atribuídos 11 alunos de Projecto.

A aluna Paula Alexandra Rodrigues e Araújo Guedes já integra o grupo.

Os alunos devem comparecer nos dias 26 e 27 de Fevereiro de 2009 (5^a e 6^a feira), das 14.30 h às 16.30 h, no gabinete 3.53, para verificarem e validarem a respectiva ficha de candidatura.

A atribuição dos temas será realizada no dia 4 de Março de 2009, às 14.30h, no anfiteatro A1.

18 de Fevereiro de 2009

Pel' A Comissão Científica da Licenciatura em Química

Maria Luísa Ferrão