

**Licenciatura em Química**  
**TEMAS E RESUMOS DOS PROJECTOS**  
**Ano Lectivo 2009 / 2010**

Nº	Temas de Projecto	Orientador	Área	Nº alunos
1*	<p><b>Uso de técnicas de preparação de amostras (extracções assistidas por membranas, extracção de fase sólida e outras) na análise de compostos presentes em diversas matrizes alimentares</b></p> <p>Neste trabalho pretende-se desenvolver e validar metodologias analíticas para o controlo analítico da qualidade de alimentos. O processo analítico envolverá a optimização de estratégias de preparação de amostras, de medição instrumental e de tratamento e interpretação de resultados.</p> <p>Técnicas a Utilizar: Técnicas de extracção assistidas por membranas; Técnicas de extracção de fase sólida; Cromatografia líquida com detecção UV (HPLC/UV); Voltametria; Cromatografia gasosa com detecção por espectrometria de massa (GC-MS)</p>	<p>A. Barros  J. A. Rodrigues  P. Almeida</p>	QA	3*
2	<p><b>Incorporação e libertação controlada por extracção de headspace dinâmico e estático de aromas em materiais sólidos porosos.</b></p>	C. Moura	QA	2
3	<p><b>Síntese e caracterização de nanopartículas com características antimicrobianas : prata, ouro e óxido de zinco</b></p>	C. Melo Pereira	QA	2/3
4	<p><b>Preparação e avaliação de novas fibras de microextração em fase sólida e</b>  <b>Determinação do fungicida metalaxil-M e ferro numa planta com potencial de remediação ambiental (Solanum Nigrum)</b></p>	M. Azenha	QA	2
5	<p><b>Indicadores de ácido base: estudos de equilíbrio por espectrofotometria</b></p> <p>A dissociação de electrólitos fracos é um dos fenómenos fundamentais observado em solução. Estudos envolvendo as constantes de dissociação de ácidos e bases fracos são indispensáveis para qualquer discussão de equilíbrio homogéneo. O objectivo do tema proposto é a análise do comportamento de indicadores na presença de soluções aquosas com diversos valores de pH. A técnica de espectrofotometria de UV/Vis será utilizada para determinar a constante de dissociação de cada um dos indicadores estudados. Os espectros de absorvância traçados para os diversos indicadores serão usados para determinar os respectivos pontos isobésticos.</p>	M. D. Ribeiro da Silva	QF	2

6	<p><b>Estudo condutimétrico da micelização de misturas binárias de tensoactivos de interesse prático</b></p> <p>Os tensoactivos são compostos anfífilos que em meio aquoso se auto-associam para formar agregados moleculares de dimensão coloidal, designados por micelas, a partir de uma dada concentração em solução (concentração micelar crítica, <i>cmc</i>). Os estudos de micelização de misturas de tensoactivos têm grande interesse fundamental e importância prática, dado que as misturas ocorrem naturalmente (por ex., em membranas biológicas) e são amplamente usados em produtos comerciais, tais como produtos de limpeza, emulsões alimentares e fármacos.</p> <p>A condutimetria é uma técnica extremamente útil para a determinação da <i>cmc</i> de tensoactivos iónicos, ou de misturas em que estes estejam presentes, permitindo ainda o cálculo do grau de ionização micelar. Pretende-se com este projecto determinar a <i>cmc</i> e outras grandezas interfaciais de várias misturas binárias do tipo tensoactivo iónico/não-iónico. Poder-se-á assim comparar os parâmetros de interacção molecular e o diferente grau de sinergismo interfacial das misturas. Usar-se-ão compostos comuns comerciais e novos tensoactivos derivados de amino ácidos, de maior biocompatibilidade e de grande interesse actual, disponíveis no nosso grupo.</p>	E. Marques	QF	2
7	<p><b>Determinação laboratorial de pressões de vapor de líquidos puros, a diferentes temperaturas, sem utilização de manómetros</b></p> <p>Uma das fontes de erro na determinação laboratorial de pressões de vapor, prende-se com a determinação da pressão ambiente a que decorrem as medições que, classicamente, é determinada através de manómetros de mercúrio e de um barómetro.</p> <p>Este projecto pretende avaliar, experimentalmente, as vantagens da utilização de valores conhecidos de pressões de vapor de substâncias de referência, como medida da pressão ambiente, relativamente às medições manométricas, na determinação de pressões de vapor de líquidos puros.</p>	M. J. Monte	QF	2
8	<p><b>Arrefecimento de reactores à escala industrial. Montagem e Teste de um Sistema de Demonstração à Escala Laboratorial.</b></p> <p>Por razões ambientais e económicas os sistemas de arrefecimento de reactores à escala industrial são em geral torres de arrefecimento baseadas no fenómeno de autoarrefecimento resultante da evaporação de água resultante do fluxo de ar seco que circula em contra corrente na torre de arrefecimento.</p> <p>Este projecto tem por objectivo construir um sistema demonstrativo deste fenómeno à escala laboratorial que será posteriormente usado no Departamento de Química em acções de formação e demonstração.</p> <p>Este projecto é orientado para 3 alunos que farão em alguns casos tarefas independentes e que terá como principal objectivo o ensaio e teste do sistema de demonstração do arrefecimento de reactores à escala laboratorial que contribuirá para a formação do grupo de trabalho nas seguintes áreas: Química-Física Aplicada; Automação e controlo; Termodinâmica industrial..</p> <p>Este projecto está subdividido nas seguintes Tarefas principais:  T1-Montagem do sistema (reactor + torre de arrefecimento); T2-Ensaio e optimização do sistema monitorização baseado sistema de aquisição de dados ADAM-5000; T3-Ensaio de funcionamento do Reactor com diferentes potências; T4-Ensaio de funcionamento da torre de arrefecimento; T5-Medição de perfis de temperatura para diferentes modos de funcionamento; 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	3

9*	<p><b>Preparação e caracterização de materiais nanoestruturados</b></p> <p>Este projecto contém duas vertentes: (i) preparação, caracterização e funcionalização de nanopartículas de óxidos magnéticos e (ii) fabricação de filmes finos híbridos preparados pela técnica de auto-montagem <i>layer-by-layer</i>, usando como componentes polielectrólitos orgânicos, complexos de metais de transição e nanopartículas de óxidos magnéticos. 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	3*
10	<p><b>Análise filtros solares e dos seus produtos de degradação nas águas das piscinas</b></p> <p>A sensibilidade da população para a utilização de protectores solares tem aumentado. Por outro lado tem também aumentado a investigação sobre a presença em sistema ambientais aquosos onde a sua presença (em particular o filtro solar) é prejudicial ao ambiente e um potencial factor de risco ambiental para a saúde humana. Uma área de investigação ainda na sua fase muito inicial é o estudo da presença de filtros solares nas águas das piscinas e dos produtos que se formam quando reagem com o cloro usado como desinfectante e sob o efeito da radiação solar. Neste projecto será desenvolvida uma metodologia de análise química quantitativa para o filtro solar 4-metoxicinamato de 2-etil-hexilo e dos seus produtos de reacção com cloro e foto-degradação. Desenvolver-se-ão técnicas baseadas em LC-MS e GC-MS assim como técnicas de pré-concentração do tipo SPE e micro-extracção líquido-líquido.</p>	J.E. Silva	QI	3
11	<p><b>Validação de sistemas em Análise por Injecção em Fluxo</b></p>	L. M. Álvares Ribeiro	QI	3

12	<p><b>Desenvolvimento de novos antioxidantes tendo como base modelos naturais</b></p> <p>O desenvolvimento de novos antioxidantes de natureza fenólica, de origem natural ou sintética, é actualmente um relevante tema de investigação na área das Saúde e Alimentar.</p> <p>De facto, têm sido levados a cabo vários estudos com vista à obtenção de novos antioxidantes para serem usados na prevenção/minimização de processos oxidativos. Os derivados fenólicos, como os ácidos benzóico e cinâmico ou flavonóides, têm sido frequentemente usados como modelos para o desenvolvimento deste tipo de compostos. Estudos recentes sobre a actividade biológica de ácidos fenólicos de origem natural permitiram concluir que os ácidos sinápico, ferúlico e cafeico, tal como os seus análogos são agentes antioxidantes promissores.</p> <p>O presente projecto visa a síntese de vários ácidos cinâmicos, e derivados e a determinação das suas propriedades físico-químicas e antioxidantes. A estratégia será guiada através de um estudo de relação estrutura-propriedade-actividade.</p> <p>As principais técnicas deste projecto envolvem síntese, métodos de purificação e métodos espectrofotométricos.</p>	F. Borges	QO	2
13	<p><b>Síntese de tensoactivos biocompatíveis derivados da lisina com cadeias alquílicas de tamanhos diferentes</b></p> <p>O projecto consta da síntese de tensoactivos aniónicos derivados do <math>\alpha</math>-aminoácido proteínogénico lisina por condensação com ácidos gordos naturais. Através de uma sequência de reacções de condensação, hidrogenação catalítica e de saponificação, serão obtidos derivados da lisina com os seus dois grupos amino ligados a cadeias acílicas que possuam um número diferente de grupos metileno (C8 a C16).</p> <p>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 benziloxycarbonilo, 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.</p> <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.</p>	M. J. Araújo	QO	2/3

14	<p><b>Síntese de tensoactivos catiónicos/aniónicos derivados da serina como potenciais veiculadores de fármacos</b></p> <p>A obtenção dos tensoactivos (monoméricos e do tipo gemini) derivados da serina envolve várias etapas sintéticas. Dependendo do tensoactivo pretendido, ter-se-á que estabelecer a melhor sequência reaccional. De entre as reacções a realizar podem destacar-se as seguintes:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Aminoação redutiva de aldeídos “gordos” (C12, C14, C16 e C18, obtidos por oxidação prévia dos correspondentes álcoois) com a serina.</li> <li>- Aminoação redutiva de formaldeído com a serina / derivados da serina.</li> <li>- Introdução de espaçadores por aminoação redutiva de dialdeídos com os aminoácidos N-alkilados obtidos previamente.</li> <li>- Introdução de espaçadores por reacção de condensação peptídica entre os aminoácidos N-alkilados / N-protegidos e diaminas [H<sub>2</sub>N-(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-NH<sub>2</sub>].</li> <li>- Metilação exhaustiva com iodometano.</li> </ul> <p>Será efectuada a purificação e caracterização estrutural de todos os compostos sintetizados.</p>	M. L. Vale	QO	2
15	<p><b>Síntese em fase sólida de péptidos bioactivos</b></p> <p>Este projecto visa a síntese química de um pequeno conjunto de péptidos bioactivos, através da aplicação de metodologias de síntese peptídica em fase sólida. Os péptidos serão construídos passo a passo sobre um polímero insolúvel ("resina") e, uma vez completa a sua sequência de aminoácidos, serão clivados desse polímero através de processos acidolíticos que resultam na obtenção do péptido bruto em solução, descartando-se o polímero. A solução peptídica será depois tratada com vista ao isolamento do péptido e sua análise por cromatografia líquida de alta eficiência com detecção por díodos (HPLC-DAD) e por espectrometria de massa com ionização por electrospray e detecção por armadilha de iões (ESI-IT MS). Utilizar-se-ão as técnicas de espectrofotometria de UV-Vis ou Análise de Aminoácidos para a quantificação dos produtos peptídicos e, caso seja necessário, estes serão purificados por cromatografia líquida de média pressão (MPLC). Os péptidos-alvo têm actividade como agentes antibióticos e/ou regeneradores de tecido ósseo, destinando-se à concepção de novos Biomateriais no âmbito de um projecto multi-disciplinar que envolve três instituições da UPorto: FCUP, IBMC e INEB.</p>	P. Gomes	QO	2

16	<p><b>Reacção de aza-Diels-Alder entre oximas de glioxilatos O-funcionalizados e dienos: Contribuição à síntese de heterociclos bioactivos</b></p> <p>O estudo experimental das metodologias de síntese adequadas para a preparação de diversos derivados pirrolidínicos e/ou piperidínicos (aza-sugars) enantiomericamente puros e potencialmente anti-víricos e/ou antineoplásicos, a partir de aductos originados 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 Diels-Alder entre oximas de glioxilatos O-funcionalizadas (com grupos benzilo, acilo e sulfonilo) e dienos (ciclopentadieno e dieno de Danishefsky), como contributo ao desenvolvimento de novos precursores sintéticos de derivados pirrolidínicos de interesse biológico.</p> <p>Reacção de Aza-Diels-Alder. Estudo da diastereosselectividade.</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 N-hidroxilamina, serão transformados nas correspondentes oximas quirais, as quais poderão ser funcionalizadas (benzilação, acilação ou sulfonação) e utilizadas como dienófilos quirais frente ao ciclopentadieno e/ou dieno de Danishefsky para permitir a obtenção de aductos diastereómeros susceptíveis de separação cromatográfica.</p> <p>Técnicas experimentais: RMN (1H e 13C), IR, MS e técnicas cromatográficas.</p>	E. Borges	QO	2/3
----	---	-----------	----	-----

- O trabalho correspondente aos temas 1 e 9 vai ser realizado por 6 alunos que obtiveram bolsas de iniciação à investigação (BII) para o ano lectivo 2009-2010:

Ana Catarina gomes Oliveira  
Carlos Eduardo Vinhas Fernandes  
Carolina Azevedo Ferreira Alves  
Mariana Raquel Maia da Rocha  
Nuno Miguel Ferreira Lino Faustino  
Rui Miguel de Castro e Ramos

- Assim, os temas 1 e 9 já estão destinados e não poderão ser escolhidos.

**A atribuição dos temas será realizada no dia 9 de Fevereiro de 2010, às 14.30h, no anfiteatro A2.**

Porto, 2 de Fevereiro de 2010

Pel' A Comissão Científica da Licenciatura em Química

Maria Luísa Ferrão