

Boletim da Sociedade
Portuguesa de Química

5,00 € - Distribuição
gratuita aos sócios da SPQ

julho-setembro
Vol. 49 | N.º 178 | 2025
Publicação Trimestral

Química



**Sociedade Portuguesa
de Química**





Editorial | 134

Direção | 135

Perspetiva

137

Entradas nos Cursos de Química
| 137

In Memoriam

139

Carlos Corrêa, 13/08/1936
– 07/07/2025 | 139

Notícias | 141

Atualidades Científicas | 152

Ongoing

156

GEO-Glass - Geochemical Signatures
in Degraded Glass: Implications for
Provenance Studies | 156

Teses

157

Integrated Strategies for the Deve-
lopment of a Novel Functional Be-
verage with Sustainable Production
Systems | 157

Catalytic C–H Activation of Small
Carbon Molecules by Groups 11 and
12 Metals Towards Sustainable Syn-
thesis of Added Value Products | 158

Artigos

159

Sistemas Aquosos Bifásicos com
Líquidos Iónicos: Novas Abordagens
em Bioanálise | 159

Uma Nova Abordagem para a Terapia
do Cancro da Mama Metastático | 169

Luz, Metal, Ação! A Sinergia de Ma-
crociclos e Dansilo na Remediação
Ambiental | 173

Enriquecimento de Muffins com
Bagaço de Uva: Composição Nu-
tricional, Fenólica e Capacidade
Antioxidante | 181

Nas Redes | 189

Química Entre Nós | 190

Espaço dos Mais Novos | 191

Destaques | 193

Agenda | 195



O ano de 2025 ficará assinalado como o momento em que a SPQ apresentou à comunidade de Químicos portugueses a sua nova identidade, lançada no contexto mais simbólico possível: o XXIX Encontro Nacional da SPQ, em Coimbra, que reuniu centenas de participantes de todas as áreas da Química, promovendo o diálogo entre gerações, a partilha de descobertas e a celebração da excelência científica desta ciência central. O *rebranding* é agora também sublinhado nesta edição do *QUÍMICA*, reafirmando o seu significado. Mais do que uma alteração estética, esta mudança traduz a continuidade da essência de uma missão centenária, projetada para o futuro.

A lógica do *rebranding* inspira-se na própria natureza da Química, ciência de transformação. O triângulo, subentendido nas retortas da imagem que agora é substituída, forma universal e intemporal, multiplica-se em cubo, evocando solidez, construção coletiva e abertura a novas possibilidades. A diagonal ascendente sugere energia positiva e descoberta. A tipografia, simultaneamente geométrica e humana, traduz rigor e proximidade, clareza e acessibilidade. A paleta cromática – do Verde Futuro ao Lilás Otimista, passando pelo Azul Confiança e o Amarelo Positivo – exprime valores como esperança, curiosidade, impacto real e respeito. Tudo converge para afirmar que a “Boa Química para o Futuro” não é apenas uma assinatura: é o nosso propósito.

Esta edição do *QUÍMICA* coincide com outro momento simbólico: o início de um novo ano letivo, também um sinal de renovação. No conjunto das 1.ª e 2.ª fases do Concurso Nacional de Acesso de 2025 registou-se uma diminuição significativa no número de candidatos face a anos anteriores. Ainda assim, a taxa global de colocação manteve-se elevada. Neste quadro, os cursos de Química e afins mantiveram, em muitas universidades, taxas de colocação elevadas, sinal de atratividade e reconhecimento. Noutras instituições, em particular no ensino politécnico, a captação revelou-se mais difícil, refletindo dinâmicas regionais e perceções diferenciadas de empregabilidade. O panorama confirma, assim, um quadro de contrastes: vitalidade e prestígio em várias universidades, mas também o desafio de garantir coesão e sustentabilidade em todo o sistema nestas áreas de formação. Tal como a SPQ se renova para melhor servir a comunidade, também os novos estudantes nesta área simbolizam a renovação. Cada matrícula é um gesto de confiança na Química e no seu papel transformador.

O *rebranding* da SPQ mostra também que nenhum símbolo é imutável: renova-se para continuar a significar. Assim também acontece com a vida da nossa comunidade, onde a perda de figuras maiores se converte em legado, e o seu exemplo perdura como parte do nosso património coletivo. Neste número prestamos homenagem a Carlos Corrêa (1936-2025), cuja vida e obra marcaram gerações de estudantes e professores, deixando um contributo duradouro na história da Química no nosso país. Assinalamos igualmente, com profundo pesar, o falecimento de José Simões Redinha (1927-2025): o seu exemplo de rigor, dedicação e serviço público será evocado no próximo número do *QUÍMICA*.

Neste cruzamento de símbolos, tempos, memórias e gerações, é reafirmada a convicção que nos guia e une: a Química é a ciência de possibilidades infinitas. É ela que transforma a matéria e é através dela que nos transformamos como comunidade e como Sociedade, com o lema de uma “Boa Química para o Futuro”. Com todos. Para todos. Com um bom Desassossego, a inquietação criadora que impede a rotina, inspira a ciência e abre caminho à renovação.

Tudo quanto vive, vive porque muda; muda porque passa; e porque passa, morre. Tudo quanto vive, subsiste porque se transforma (Bernardo Soares/Fernando Pessoa).

>

Paulo Mendes

BOLETIM DA SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

PROPRIEDADE DE SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

NIPC: 501 139 265

ISSN 0870 – 1180

Registo na ERC n.º 125 525

Depósito Legal n.º 51 420/91

Publicação Trimestral

N.º 178, julho-setembro 2025

REDAÇÃO, EDIÇÃO E ADMINISTRAÇÃO

Av. da República, 45 – 3.º Esq. – 1050-187 Lisboa

Tel.: 217 934 637 • Fax: 217 952 349

bspq@uevora.pt • www.spq.pt

Diretor: Paulo Mendes**Diretores-adjuntos:** Ana Paula Esteves, Bruno Machado, Maria José Lourenço, Pedro S. F. Mendes, Vasco D. B. Bonifácio**Comissão de Aconselhamento Editorial:**

Augusto Tomé, Helder T. Gomes, João Paulo R. F. André, Joaquim L. Faria, Jorge Morgado, Mário N. Berberan-Santos

ESTATUTO EDITORIAL

Disponível em:

www.spq.pt/boletim/estatuto_editorial

PUBLICIDADE

Sociedade Portuguesa de Química

secretariado@spq.pt

DESIGN GRÁFICO E PAGINAÇÃO

Rodrigo Nina

www.rodigonina.com

rodrigo.pnina@gmail.com

Tel.: 964 819 822

IMPRESSÃO E ACABAMENTO

Sersilto, Empresa Gráfica, Lda.

Travessa Sá e Melo, 209, Apartado 1208

4490-116 Gueifães, Maia

+351 229 436 920

administracao@sersilto.pt

Tiragem: 1.300 exemplares

As colaborações assinadas são da exclusiva responsabilidade dos seus autores, não vinculando de forma alguma a SPQ, nem a Direção do *QUÍMICA*. São autorizadas e estimuladas todas as citações e transcrições, desde que seja indicada a fonte, sem prejuízo da necessária autorização por parte do(s) autor(es) quando se trate de colaborações assinadas. As normas de colaboração e as instruções para os autores podem ser encontradas no sítio web da SPQ.

PUBLICAÇÃO SUBSIDIADA PELA
FCT Fundação
para a Ciência
e a Tecnologia

 Apoio do Programa Operacional Ciência, Tecnologia,
Inovação do Quadro Comunitário de Apoio III

Boa Química para o Futuro: A Nova Identidade da SPQ

O primeiro escrito de química publicado em Portugal remonta, muito provavelmente, a 1797 (Domingos Vandelli, “Várias observações de Chimica e História Natural,” in *Memórias da Academia Real das Sciencias de Lisboa*). Em janeiro de 1905, um pequeno grupo de cientistas portugueses, entre os quais se destacou António Joaquim Ferreira da Silva, que viria a ser o primeiro presidente da Sociedade, abalçou-se no lançamento da *Revista de Chimica Pura e Aplicada*, movidos pela necessidade urgente de criar uma revista portuguesa de química. A fundação da *Sociedade Chimica Portuguesa* viria a concretizar-se em 28 de dezembro de 1911, em assembleia geral, em Lisboa. Em 1927, dá-se a fusão com a Secção de Física, que lhe estava anexa desde 1917, originando a Sociedade Portuguesa de Química e Física. Em Fevereiro de 1974, com a criação da Sociedade Portuguesa de Física, a Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) autonomizou-se como continuação da antiga Sociedade Portuguesa de Química e Física.

Após um longo período de indefinição, a SPQ conheceu um novo impulso em 1975 quando um grupo de associados se constituiu numa Comissão *ad hoc* dedicada ao seu relançamento. A Comissão Instaladora, eleita em Assembleia Geral de julho desse ano, era constituída por Jorge Calado e Romão Dias (Instituto Superior Técnico), e Cardoso Pereira, Silveira Ramos, J. C. R. Reis e César A. N. Viana (Faculdade de Ciências de Lisboa).

A esta Comissão coube a responsabilidade de assegurar as condições mínimas de funcionamento da SPQ, promover a sua dinamização a nível nacional e lançar as bases de um plano de atividades estruturante. Uma das suas primeiras preocupações foi conseguir uma sede própria independente e dotada de serviços administrativos adequados. Com o apoio do Instituto de Alta Cultura, foi possível concretizar o arrendamento de um andar na Avenida da República, 37, 4.º, Lisboa. A sede foi então mobilada graças a um generoso subsídio da Fundação Calouste Gulbenkian. No final dos anos 1990, a SPQ mudou-se um quarteirão, para se instalar no 45, 3.º da mesma avenida, onde se encontra atualmente.

Ao longo das últimas décadas, a SPQ soube adaptar-se à evolução das necessidades da comunidade química, passando das publicações nacionais para uma participação ativa em revistas europeias, inicialmente através da ChemPubSoc Europe, hoje *Chemistry Europe*, garantindo à química portuguesa visibilidade internacional e apoio às novas gerações de químicos.

É chegado o momento de iniciar um novo ciclo. A atual sede dá mostras de uma severa insustentabilidade,

agravada pelo novo contexto laboral e socioeconómico que emergiu no pós-pandemia de 2020. A criação de um Centro de Formação da SPQ requer infraestruturas de apoio mais modernas e adequadas a atividades presenciais. A partilha de espaço com as Sociedades de Física, Matemática e Filosofia, começa a revelar-se menos viável que até aqui.

Quanto à imagem da SPQ, baseada nas três retortas estilizadas, esta surgiu pela primeira vez no n.º 1 do volume 5 da Revista Portuguesa de Química, em 1963. Foi criada para representar a prática laboratorial e a tradição científica da química em Portugal. Durante anos, esta imagem teve enorme importância como elemento agregador da comunidade química. Em setembro de 1993, Luís Moreira foi o *designer* responsável pela renovação e normalização da identidade visual da SPQ, resultando na forma desde então usada, mantendo, ainda assim, o símbolo das retortas, agora mais estilizadas.

O XXIX Encontro Nacional da SPQ, que teve lugar de 20 a 23 de julho de 2025, estabeleceu mais um marco nesta jornada de renovação, compromisso e serviço às ciências químicas em Portugal, ao lançar a nova imagem da Sociedade. Associada a esta nova imagem, este ciclo inclui também um plano de sensibilização para uma química mais positiva, integradora e responsável, inspirado nos valores de ética, diversidade, equidade e inclusão.



**Sociedade Portuguesa
de Química**

É com grande orgulho e um sentido de continuidade que, ao revelarmos a nova imagem da SPQ, símbolo da nossa evolução, reafirmamos o nosso compromisso com a inovação, a inclusão e a excelência, mantendo-nos profundamente ancorados nos valores que nos guiaram por mais de um século. Esta nova imagem representa uma Sociedade que honra o seu passado enquanto abraça o futuro, continuando a construir uma comunidade química forte, vibrante e responsável, em Portugal, e além-fronteiras.

> **Joaquim Faria**
Presidente da SPQ
jlfaria@fe.up.pt

> **António Jorge Parola**
Secretário-Geral da SPQ
ajp@fct.unl.pt

> **Pedro Góis**
Secretário-Geral Adjunto da SPQ
pedrogois@ff.ulisboa.pt

Boa Química para o **Futuro**



Sociedade Portuguesa
de Química

Entradas nos **Cursos de Química**

O ensino superior em Portugal, especialmente nas áreas de Química, Bioquímica e Engenharia Química, tem revelado padrões distintos de procura e de ocupação de vagas nos principais estabelecimentos universitários do país. A análise dos dados disponíveis permite compreender melhor o interesse dos candidatos nestes cursos e identificar possíveis desafios para o futuro.

Os cursos de Bioquímica apresentam uma procura significativamente elevada, com todas as vagas ocupadas na maior parte das instituições que os oferecem. O mesmo cenário verifica-se em Engenharia Química na FEUP, IST, NOVA, ISEP e UC, onde não restam lugares disponíveis. Igual é o que se passa quanto à licenciatura em Química na FCUL e Química Aplicada na NOVA, estando as vagas praticamente preenchidas após a 2.^a fase do concurso nacional de acesso.

No conjunto das duas primeiras fases foram colocados cerca de 1290 estudantes em cursos de Química e relacionados, para cerca de 1411 vagas, o que representa uma taxa de ocupação de 82,6%.

Existe um grupo de cursos com entradas que solicitam, entre outras, a prova de Física e Química A, cujo nível e a elevada procura os torna muito competitivos. Alguns desses cursos (p. ex., Bioengenharia, Engenharia Biomédica e Engenharia Biológica) destacam-se por ter a nota mínima de ingresso mais elevada que a dos cursos de Química, Bioquímica, e Engenharia Química analisados. São cursos com uma procura muito elevada, com reconhecimento nacional e boa empregabilidade. Outros cursos claramente seletivos deste ponto de vista incluem Engenharia Química na FEUP e no IST, ambos altamente competitivos e muito procurados. Nas áreas das Ciências da Vida, os cursos de Bioquímica na FCUP e na NOVA-FCT figuram no topo das opções, especialmente entre candidatos mais interessados em carreiras científicas e de investigação.

Num segundo grupo, encontram-se os cursos que exigem notas de ingresso mais moderadas, entre os 120 e os 140 pontos. Aqui, a Química Aplicada na NOVA-FCT, e a Química da FCUL e UA são exemplos de licenciaturas equilibradas, que combinam uma procura relevante com um acesso menos restrito em comparação com os cursos de topo. Bioquímica na UMinho e na UC-FCT, e os cursos de Engenharia Química e Engenharia Química e Biológica, também se destacam por abrirem portas a um conjunto diversificado de candidatos, mantendo um grau de exigência razoável e boas

oportunidades de inserção profissional.

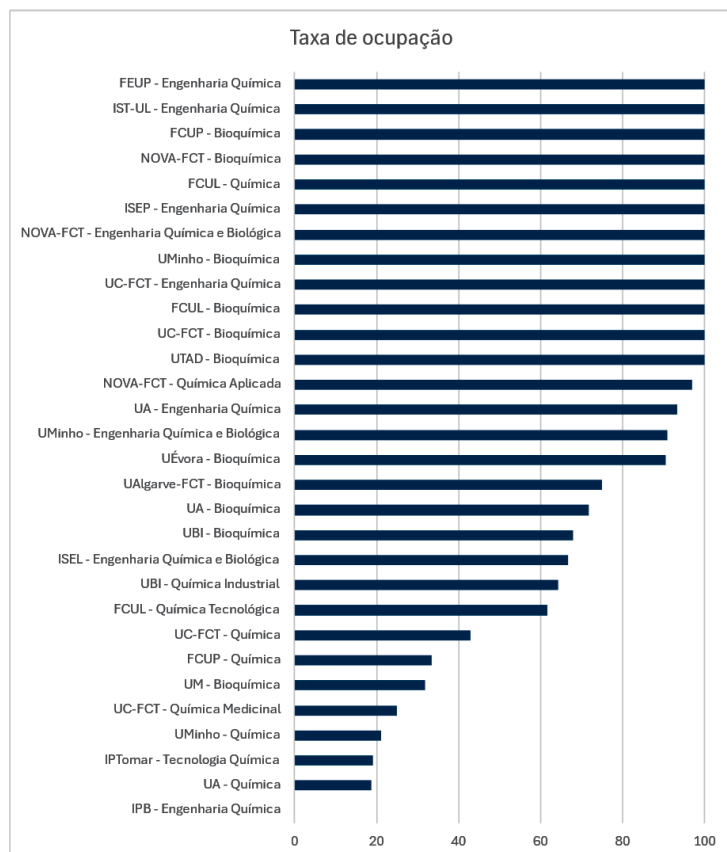
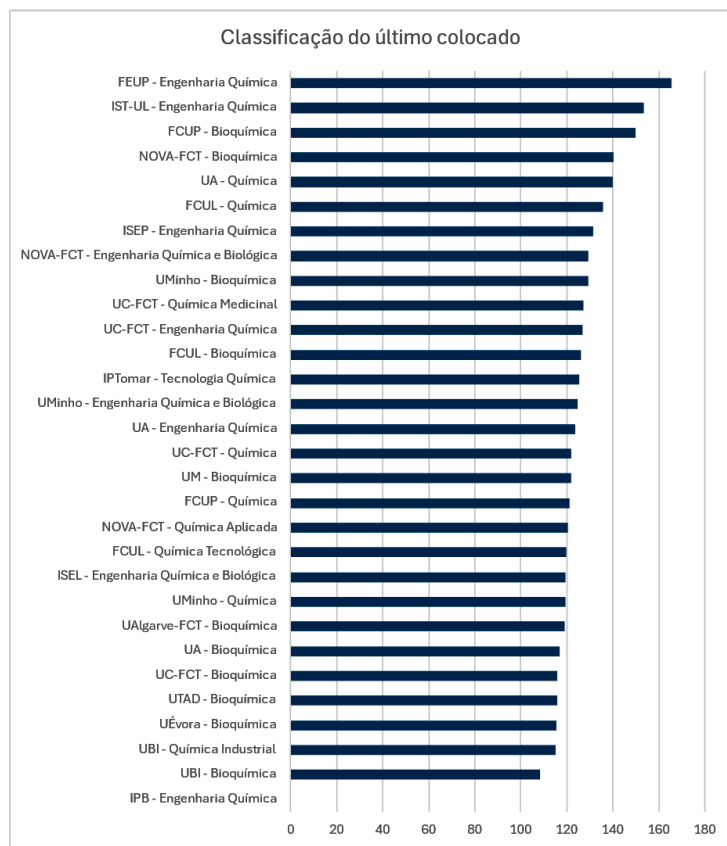
No extremo oposto, situam-se os cursos com notas mínimas de ingresso mais modestas, como Química Industrial na UBI, Química Tecnológica na FCUL, e Bioquímica na UBI e UTAD. Estes cursos podem ser vistos como opções alternativas, muitas vezes procuradas por candidatos que, apesar de não terem médias muito elevadas, demonstram interesse e vocação pelo campo das ciências químicas. Funcionam, portanto, como porta de entrada para o ensino superior e para carreiras técnicas, laboratoriais ou industriais, contribuindo para a formação de profissionais em várias regiões do país, num contexto eventualmente mais marcado pela acessibilidade geográfica.

A taxa de ocupação é um forte indicador da atratividade e reputação dos cursos e instituições. Os cursos ministrados na FEUP, IST, FCUP, NOVA-FCT, FCUL, IPP (ISEP), UMinho, UC-FCT e UTAD atingem a marca dos 100%, confirmando a preferência dos candidatos e o elevado reconhecimento do mercado por estas formações. Tal facto reforça não só a solidez destas escolas na formação científica e tecnológica, como também a importância de uma oferta educativa alinhada com as necessidades do país e da economia do conhecimento.

O panorama atual demonstra que, embora alguns cursos mantenham uma procura estável e alta, outros enfrentam desafios na atração de novos estudantes. O caso da Engenharia Química no IPB é paradigmático de um curso com procura nula, mas que acaba por resolver a situação com uso de regimes especiais, sobretudo para estudantes de formação diversa, ou mobilidade internacional. Fatores como localização, reputação, empregabilidade e interesses dos candidatos podem explicar estas diferenças.

O acompanhamento contínuo destas tendências será essencial para ajustar estratégias de divulgação e oferta formativa, de forma a garantir o equilíbrio entre procura e oferta no ensino superior português.

A SPQ, atenta a estas motivações, está a operar em todas as frentes, desde o ensino não universitário até à formação avançada e pós-graduação, tentando atuar de forma integrada no conjunto das suas ações. A preocupação com o atual número de cursos que pode exigir química à entrada, mas que depois não reflete verdadeiramente uma componente de conhecimento química, provoca uma dispersão da procura que pode levar ao afastamento injustificável de colocados em cursos tradicionalmente



comprometidos com a Química. A Química é e será sempre uma ciência de charneira, na qual assenta o desenvolvimento da humanidade. Como a ciência da transformação, ela própria tem-se transformado para ir ao encontro dos maiores desafios globais.

>

Joaquim L. Faria

FEUP - Universidade do Porto

Presidente da SPQ

jlfaria@fe.up.pt

>

Marta Piñero

DQ - Universidade de Coimbra

mpineiro@qui.uc.pt

Carlos Corrêa, 13/08/1936 – 07/07/2025



Homenageamos aqui um jovem de Barcelos que conseguiu saltar as barreiras para chegar à universidade e ser engenheiro. A barreira de Barcelos ao Porto na década de 1950 implicou uma dívida pessoal que foi paga 56 anos depois!

Concluído o equivalente ao atual 9.º ano em Barcelos, teria de ir frequentar o liceu de Braga. Para evitar os custos de deslocação, fez a preparação dos exames finais do ensino secundário com o simples apoio de um explicador em Barcelos para se propor a exame. A etapa seguinte seria a universidade, no Porto, mais distante e mais cara. Estávamos em 1955. Calouste Gulbenkian falecera e deixara a sua fortuna nas mãos do seu advogado Azeredo Perdigão, para criar uma fundação. A notícia chegou a Barcelos e Carlos Corrêa escreveu a Azeredo Perdigão a pedir apoio para frequentar a universidade. Não havia ainda Fundação, e foi com grande surpresa que soube que iria ter um empréstimo de 750\$00 por mês. Teve assim a garantia de uma vida estudantil relativamente confortável no Porto. Criada a Fundação Calouste Gulbenkian em 1956, nunca lhe foi pedida a devolução do empréstimo. Para o jovem engenheiro e professor da Universidade do Porto não teria sido fácil fazer a devolução nos seus primeiros anos de vida adulta, mas não esqueceu a dívida. Em 2018, foi a Lisboa pagar a sua dívida e só então soube que, na sua ficha pessoal, havia a menção de bolsheiro número um! Ficou também como número um, e talvez único, a devolver à Fundação uma bolsa de estudos, por inteiro e com correção monetária.

Quem entrasse no laboratório de química orgânica do edifício dos Leões (hoje Reitoria da Universidade do Porto) ia encontrar sólidas bancadas de madeira exótica que poderia julgar transportadas diretamente de Oxford. De facto, vieram de lá! O Carlos fez o seu doutoramento no *Dyson Perrins Laboratory* da Universidade de Oxford com um trabalho sobre radicais livres. Foi profundamente marcado por esta experiência, quer pessoal quer cientificamente. E, com a memória ainda fresca, copiou o desenho das bancadas quando foi chamado a modernizar o seu laboratório pouco depois de regressado ao Porto.

O Reino Unido tinha já recuperado da Segunda Guerra e, apesar de estar a fechar o seu ciclo imperial, estava em plena expansão económica. Para um jovem de Barcelos, era um maravilhoso mundo novo. A pujança da economia, a vitalidade da democracia, o desafio de se integrar numa das mais dinâmicas universidades do mundo. A transição do Porto para um dos mais famosos laboratórios de Química Orgânica abria um mundo que nunca teria sido sequer imaginado. E foi aí que o Carlos cresceu e venceu. Temos de recordar a dormência da universidade portuguesa da época, muito marcada pelas “contas certas” do Estado Novo. As universidades do Porto e de

Lisboa tinham sido criadas em 1911 integrando a Escola Politécnica (em Lisboa) e a Academia Politécnica (no Porto). Os quadros docentes tinham sido congelados logo a seguir à queda da 1.ª República, fruto dos problemas financeiros próprios e da depressão económica mundial.

Na década de 1960, a procura estudantil crescia rapidamente, mas nem o quadro docente nem as paredes da velha Academia Politécnica se tinham alargado. E os salários dos docentes pressupunham que estes teriam rendimentos próprios ou outra profissão principal. O Carlos Corrêa contava que, quando foi convidado para Assistente da Faculdade de Ciências, a pergunta prévia fora sobre os rendimentos familiares que lhe permitiriam alimentar a família. De facto, a sua sobrevivência na universidade dependeria de provir de uma família com rendimentos próprios ou de se organizar com outra atividade principal. Para um jovem que conhecia a vida universitária inglesa, a opção pela dedicação ao ensino e à investigação na universidade portuguesa implicava uma vida austera, mesmo acumulando muitas horas extraordinárias de docência. Assim foi até 1979, até à criação da figura da dedicação exclusiva no primeiro Estatuto da Carreira Docente. E assim foi com o Carlos Corrêa.

O jovem Professor Carlos Corrêa começava a formar o seu grupo de investigação iniciando jovens licenciados (os mestrados só apareceriam em 1980) nos segredos dos seus radicais livres. Mesmo em condições muito difíceis e só com a pequena ajuda de um “projeto do IAC, Instituto de Alta Cultura”, o antecessor, em miniatura, das unidades de investigação criadas na década de 1990. Com a madrugada de 1974, a vida ganhou novo alento, mas também ficaram em suspenso todos os projetos anteriores.

Sempre disponível, o Carlos ocupou quase todos os cargos de gestão do Departamento e da Faculdade, tarefas pesadas e raramente gratificantes. Desde 1979 até uns poucos dias antes de falecer, manteve um trabalho contínuo nos seus manuais de Química para o ensino secundário e noutros instrumentos de apoio à preparação para os exames. Assim influenciou milhares de alunos de sucessivas gerações ao longo de quase meio século. E ainda alargou as suas propostas de manuais a Angola e a Cabo Verde. Fazia-o com o prazer de quem se sente a moldar o intelecto de sucessivas gerações.

A Química em Portugal deve muito a Carlos Corrêa, pelos seus manuais ao longo dos últimos 45 anos e pelas suas demonstrações experimentais que empolgaram alunos e professores. Na Universidade do Porto fez uma carreira brilhante na ligação de uma época em que se esperava quase só o ensino até à moderna universidade que recebe quase 60% da coorte jovem e que olha principalmente para a investigação.

>

José Ferreira Gomes
jfgomes47@gmail.com

The Journal for Excellence in Chemistry, Open to All

The flagship journal of
the Chemistry Europe
publishing association

Why publish with *ChemistryEurope*?

- Fully open access for global reach and impact
- No article publication charges until June 2026
- Highest publishing standards backed by a team of academic Editors-in-Chief and expert in-house editors
- Rapid dissemination of your research through fast editorial decisions and efficient article processing



The high-impact, open-access complement
to *Chemistry* — *A European Journal*



Editors-in-Chief



Luisa De Cola



Lars C. Grabow



Ken Tanaka

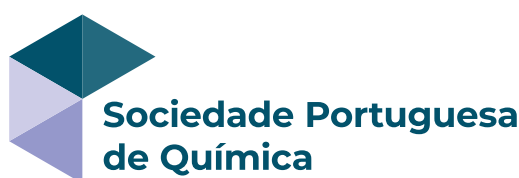
XXIX Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química

Química: a ciência que nos une, deu o mote para o XXIX Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) que teve lugar em Coimbra, a Cidade dos Estudantes, e o berço de uma das mais antigas universidades da Europa, entre 20 e 23 de julho do corrente ano de 2025. Trata-se do mais emblemático evento da comunidade química de Portugal, tendo reunido mais de 300 participantes, nacionais e estrangeiros, de todas as áreas da química – orgânica, analítica, inorgânica, física, ambiental, entre outras – promovendo a integração entre investigação, ensino e aplicação industrial. Esta iniciativa visa oferecer um espaço de inovação, partilha, inspiração e descoberta, reforçando o papel da Química como ciência central da transformação e mote unificador para um futuro sustentável.

A sessão inaugural incluiu a entrega dos prestigiosos prémios SPQ, o Prémio Ferreira da Silva, atribuído a Artur Silva (Professor Catedrático, Universidade de Aveiro), e o Prémio Fraústo da Silva, concedido a João Rocha (Professor Catedrático, Universidade de Aveiro). Nessa sessão foram ainda distinguidos pela sua categoria e contributo científico, como Sócios Honorários, Bernardo Jerosch Herold e Artur Silva. Esta sessão terminou com um dos momentos mais marcantes desta edição: o lançamento da nova imagem da SPQ para o século XXI, simbolizando uma Sociedade renovada, dinâmica e virada para o futuro.

Esta nova imagem representa uma Sociedade que honra o seu passado enquanto abraça o futuro, continuando a construir uma comunidade química forte, vibrante e responsável em Portugal e além-fronteiras. Associada à nova imagem, está em marcha um plano de divulgação nacional e de consciencialização para uma química mais positiva, integradora e responsável, inspirados nos valores de ética, diversidade, equidade e inclusão.

■ Nova arquitetura da marca Sociedade Portuguesa de Química.



No campo científico, assistimos a um programa de luxo com conferências plenárias inspiradoras e de elevado rigor científico, a cargo de Ehud Keinan (Presidente da IUPAC), Troels Skrydstrup (Professor na Aarhus University e membro do Novo Nordisk CO₂ Research Center, Dinamarca), Teresa Pinho e Melo (Universidade de Coimbra), Mónica López Fanarraga, (Universidad de Cantabria, Espanha), Davide Bonifazi (Universität Wien, Áustria), Artur Silva (Universidade de Aveiro – Prémio Ferreira da Silva), João Rocha (Universidade de Aveiro – Prémio Fraústo da Silva) e Hermenegildo García (Universitat Politècnica de València – Prémio Luso-Espanhol de Química). Os galardoados proferiram magníficas lições plenárias, que honraram a excelência da química ibérica.



Da esquerda: Artur Silva (Prémio Ferreira da Silva, Sócio Honorário), João Rocha (Prémio Fraústo da Silva), Bernardo Jerosch Herold (Sócio Honorário) e Hermenegildo García (Prémio Luso-Espanhol de Química).

O programa integrou ainda 13 contribuições convidadas, entre as quais a da Medalha Vicente Seabra, Ana Rita Lado Teixeira Ribeiro (LSRE-LCM – Laboratory of Separation and Reaction Engineering – Laboratory of Catalysis and Materials, ALiCE – Associate Laboratory in Chemical Engineering, Faculdade de Engenharia, Universidade do Porto). De salientar também a conferência de Clara Pereira (LAQV-REQUIMTE – Laboratório Associado para a Química Verde, Faculdade de Ciências, Universidade do Porto), distinguida recentemente (2024) com uma das prestigiadas bolsas ERC Consolidator Grant, atribuídas pelo Conselho Europeu de Investigação. As sessões de comunicações orais e orais curtas, distribuídas por três sessões paralelas, promoveram debates científicos de grande qualidade e evidenciaram o dinamismo da química que se faz de norte a sul do país.

Um destaque especial para a sessão *online* dedicada aos químicos portugueses no estrangeiro. Esta iniciativa representou uma excelente oportunidade para fortalecer os laços com a comunidade científica nacional que trabalha além-fronteiras. Uma oportunidade para lembrar o *Podcast* Químicos Portugueses Pelo Mundo (pod.link/1752511997), onde o fascínio da química é trazido até nós pelos químicos portugueses que estão a deixar a sua marca em diversas partes do globo. Os episódios lançados até à data já passam os 800 *downloads*.

Foram também entregues os prémios do concurso nacional que teve como tema central “A Paz”, realizado no âmbito do *Global Women’s Breakfast* (GWB2025) *Accelerating Equity in Science*, que teve lugar a 11 de fevereiro.

O Encontro acolheu a ação de formação para professores do Ensino Básico e Secundário do grupo 510, sob o tema “Onde está a Química? A Química no dia a dia”, envolvendo oito formadores e 30 formandos. Durante quatro dias, os participantes assistiram a palestras e participaram em *workshops* que evidenciaram a presença da química em múltiplos aspetos do quotidiano.

Durante dois dias, os estudantes tiveram a oportunidade única de participar na atividade *Lunch with the Experts*, partilhando a mesa - e um *lunch-bag* - com convidados de renome num ambiente informal e inspirador. À volta da conversa, fluíram temas que vão além da ciência: percursos pessoais, dúvidas e expectativas, desafios de uma carreira académica ou profissional, e visões para o futuro da química. Uma experiência autêntica de proximidade e mentoria, nas fronteiras do conhecimento e da vocação.

Os patrocínios desempenharam um papel estratégico ao contribuir para o financiamento do Encontro e facilitar a sua sustentabilidade económica. Em contrapartida, promoveram a visibilidade das empresas do setor científico e tecnológico junto dos participantes, criando mesmo oportunidades de *networking* que podem evoluir para parcerias futuras em investigação, desenvolvimento e inovação.

A ILC Lda, a Laborspirit, a M. T. Brandão e a Normax marcaram presença com os seus expositores em contacto direto com investigadores, apresentando as suas mais recentes demonstrações tecnológicas. Estas empresas receberam os participantes nos seus *stands*, partilhando conhecimento, promovendo os equipamentos científicos e fomentando a ligação entre estas empresas e a comunidade académica.

A Química continua a ser um ponto de encontro, de diálogo e de construção coletiva de conhecimento. Este Encontro promoveu a visibilidade da investigação química em Portugal e reforçou a cooperação entre cientistas, estudantes, educadores e industriais. A



Da esquerda para a direita: expositor da ILC Lda e expositor da Laborspirit.



Fotos de grupo: Auditório da Reitoria (à esquerda) e Departamento de Química (à direita) da Universidade de Coimbra.

distinção de investigadores de renome e a integração de formação para educadores reforçaram o compromisso da SPQ com a excelência científica e académica no ensino e na investigação. Que este espírito nos acompanhe em 2027, onde celebraremos o XXX Encontro Nacional da SPQ com ainda mais força, diversidade e inovação.

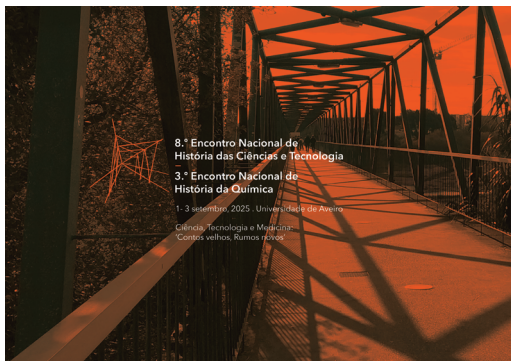
A comissão científica, a comissão organizadora e a comissão nacional agradecem a todos os participantes, palestrantes, organizadores e patrocinadores que contribuíram para o sucesso desta edição.

> **Marta Piñero**
mpineiro@qui.uc.pt

> **Joaquim L. Faria**
jlfaria@fe.up.pt

> **A. Jorge Parola**
ajp@fct.unl.pt

3.º Encontro Nacional de História da Química e 8.º Encontro Nacional de História das Ciências e Tecnologia



Decorreu entre 1 e 3 de setembro, na Universidade de Aveiro (UA), o 3.º Encontro Nacional de História da Química, promovido pelo Grupo de História da SPQ, e, pela primeira vez, em formato presencial. Este Encontro decorreu em simultâneo com o 8.º Encontro Nacional de História das Ciências e Tecnologia, cuja 1.ª edição remonta a 2009, no Centro Científico e Cultural de Macau, em Lisboa. Este Encontro manteve uma periodicidade bienal até 2018, tendo retomado o seu ritmo em 2023, na Universidade de Évora. Ambos os Encontros têm como objetivo criar um espaço de reunião, diálogo e reflexão que reúna historiadores e praticantes das ciências, educadores e todos os interessados na evolução histórica das diversas áreas científicas. Contaram com a participação de cerca de 40 investigadores, dos quais mais de metade eram jovens investigadores e estudantes dedicados ao estudo da história das ciências.

A sessão de abertura contou, nomeadamente, com a presença do Vice-Reitor para a Investigação da UA e do Presidente da SPQ.

As conferências plenárias foram proferidas por Timothy J. Mosher, Professor de Radiologia e Ortopedia da *Penn State University College of Medicine*. A sua comunicação abordou os erros de perceção em radiologia como

estudo de caso, sintetizando os desafios específicos que estes apresentam e destacando o potencial das tecnologias emergentes – como a inteligência artificial e a neuroimagem funcional – na redução de danos decorrentes de erros cognitivos.



Presidente do Grupo de História da SPQ, Professor João Oliveira, apresentando o palestrante convidado para a abertura, Professor Timothy J. Mosher da *Penn University*. Fotos de João Quintela (UA).

Numa perspetiva distinta, Manuel Ferreira Rodrigues, Professor da UA, analisou, na sua palestra, a interseção entre técnica, ciência e produção artística no contexto industrial português, evidenciando a integração tardia de contributos científicos nesta importante indústria portuguesa até meados do século XX, a partir do exemplo da Vista Alegre.

O programa científico refletiu a diversidade e complexidade das práticas e saberes científicos, abrangendo temas como: história da química, medicina, botânica e tecnologia; análise de instituições científicas, redes de conhecimento e diplomacia científica; diásporas e circulação de plantas, ideias urbanísticas e coleções coloniais; cultura material e visual da ciência; relações entre ciência, género e exclusão; epistemologia, linguagem e crítica do saber; articulações entre ciência, literatura e regimes autoritários; história ambiental, conservação e biodiversidade em contextos coloniais sul-americanos e africanos; e a emergência da tecnociência, do ativismo e da ciência cidadã, com destaque para práticas participativas fora dos circuitos institucionais tradicionais.

O programa social, incluiu um passeio Arte Nova na Cidade de Aveiro, que reforçou o ambiente de convivialidade entre os participantes. No final dos três dias, foi anunciado que a próxima edição da Conferência de História das Ciências e da Tecnologia será organizada pela Universidade de Coimbra.

Mais informações sobre os Encontros em 8enhc3enhq.web.ua.pt.

> Isabel Malaquias
imalaquias@ua.pt



Sessão de Abertura, com o Vice-Reitor para a Investigação da Universidade de Aveiro (UA), Professor Artur Silva, Presidente da SPQ, Professor Joaquim Faria, Vice-Diretor do Departamento de Física da UA, Professor Vitor Amaral, Presidente dos 8ENHCT | 3ENHQ, Professora Isabel Malaquias. Fotos de João Quintela (UA).

International Symposium on Synthesis and Catalysis 2025

Entre 2 e 5 de setembro de 2025, Coimbra acolheu a sexta edição do *International Symposium on Synthesis and Catalysis* (ISySyCat2025), um dos mais relevantes Encontros internacionais na área da síntese química e da catálise. Depois de cinco edições bem-sucedidas em Évora, o Encontro realizou-se pela primeira vez na Universidade de Coimbra (UC), Faculdade de Farmácia, mantendo o sucesso das edições anteriores pelo número de participantes e programas científico e cultural.



ISySyCat2025.

O ISySyCat tem vindo a consolidar-se como um espaço único de partilha de conhecimento e de aproximação entre academia e indústria em torno dos grandes desafios atuais nos quais a Química desempenha um papel fundamental. Durante quatro dias, Coimbra foi palco de uma verdadeira celebração da Química, reunindo cerca de 210 participantes, oriundos de 31 países, entre investigadores, jovens doutorandos e representantes da indústria. A importância da promoção do diálogo entre a academia e a indústria foi mais uma vez demonstrada pela dinâmica entre os participantes no evento, proporcionando contactos profícuos. O ambiente inclusivo e colaborativo estimulou a troca de ideias entre diferentes gerações de químicos, garantindo a renovação e a vitalidade da comunidade.

A sessão de abertura contou com a presença de Alfredo Dias (Vice-Reitor da Universidade de Coimbra), João José Sousa (Vice-Diretor da Faculdade de Farmácia, Universidade de Coimbra), Teresa Pinho e Melo (Subdiretora do Centro de Química de Coimbra, Universidade de Coimbra), Joaquim Faria (Presidente

da SPQ) e o *chairman* da conferência, Anthony Burke (docente da Faculdade Farmácia, UC).



Sessão de abertura.

A sustentabilidade foi um dos eixos dominantes do Encontro. Discutiram-se novas estratégias para tornar a síntese química mais verde, mais eficiente e menos dependente de recursos não renováveis, integrando conceitos como economia circular e redução da pegada ambiental dos processos. A química em fluxo contínuo destacou-se como uma tecnologia capaz de continuar a revolucionar a forma como a síntese é pensada e escalada, oferecendo vantagens em termos de segurança, economia de tempo e reprodutibilidade.

Outro tema central foi a catálise, abordada nas suas mais diversas vertentes. Diferentes tipos de catálise surgiram como ferramentas promissoras para abrir novas possibilidades de síntese. Demonstrou-se ainda como a catálise homogénea e heterogénea, bem como a biocatálise, continuam a desempenhar um papel essencial no desenho de processos escaláveis e adaptados à realidade industrial. Em todas estas abordagens sobressaiu a preocupação com a seletividade, a eficiência energética e a redução de resíduos, num esforço coletivo por alinhar a Química com os objetivos globais de desenvolvimento sustentável.

A interface com a Saúde representou outro pilar do programa científico. Foram apresentados avanços no desenho e síntese de novos compostos bioativos, estratégias inovadoras para descoberta de fármacos e metodologias de química medicinal aplicadas a doenças como a malária, a tuberculose e patologias neurodegenerativas. Estas contribuições sublinham a importância da Química como disciplina central no combate a alguns dos maiores desafios na área da saúde da atualidade, demonstrando como a síntese química e o papel da catálise continuam a ser motores de inovação terapêutica. Paralelamente, a área dos materiais funcionais também foi abordada, evidenciando como a Química abre caminho para o desenvolvimento de polímeros avançados, novos

dispositivos eletrônicos e aplicações em energia limpa.

Os temas abordados foram consubstanciados num programa científico que contou com 15 lições plenárias, 24 comunicações orais, 56 comunicações *flash* e 98 comunicações em painel.



Audatório, durante uma das palestras plenárias.

A atribuição de prémios para as melhores comunicação orais e em painel, patrocinados por sociedades e editoras de prestígio, reforçou o reconhecimento da excelência e do talento emergente. O prémio de melhor comunicação oral foi atribuído a Sven Erik Peters (Patrocínio: ACS Publications). O prémio de melhor comunicação em painel foi atribuído a Bram Van Den Bossche (Patrocínio: ACS Publications). A Wiley VCH patrocinou os prémios *Runner-up* na categoria de melhor comunicação oral (atribuído a Matthew Kiernan) e poster (atribuído a Amina Moutayakine). A RSC patrocinou também as melhores comunicações em painel, através das suas revistas *Organic & Biomolecular Chemistry*, *Catalysis Science and Technology*, *RSC Sustainability* e *Reaction Chemistry & Engineering*, nas áreas de Química Orgânica/Biomolecular/Medicinal (atribuído a Ángel García González), Catálise (atribuído a Wilfrido E. Almaraz-Ortiz), Química Verde/Sustentável (atribuído a Nadiia Shevchenko) e Síntese com Tecnologias Facilitadoras (atribuído a Pallav Suman). A Thieme também patrocinou prémios para comunicações em painel em três categorias relacionadas com três das suas publicações: *Synthesis* (Elisabete Carreiro), *SynOpen* (Adriana Faraone) e *Synlett* (Thomas Balle Bech). Os prémios foram entregues durante a sessão de encerramento.

O impacto do ISySyCat2025 não se esgotará nos dias de Coimbra. Em colaboração com a revista *SynOpen*, será publicada uma edição especial dedicada ao Encontro aberta a contribuições dos participantes. Esta iniciativa assegura que muitos dos avanços discutidos terão maior visibilidade internacional, prolongando no tempo a influência do ISySyCat2025.

O Encontro não viveu apenas da ciência. Houve também espaço para a partilha cultural e para o convívio, momentos que ajudaram a cimentar colaborações e amizades. A receção de boas-vindas no pátio da Faculdade de Farmácia deu o tom a um simpósio marcado pela hospitalidade e pelo espírito de partilha, enquanto o jantar de gala na Tertúlia d'Eventos, na margem do Mondego, combinou gastronomia e momentos de *são convívio*. Destaque ainda para a visita às históricas instalações da Universidade de Coimbra, ao Palácio Real, à Capela de São Miguel e à Biblioteca Joanina, bem como a visita com almoço à adegua Quinta do Encontro. Estes momentos sociais mostraram que a ciência se fortalece também no diálogo informal, no encontro de ideias à mesa e no prazer de descobrir afinidades para além da investigação.

No balanço final, a sexta edição do ISySyCat superou mais uma vez os seus objetivos e foi um enorme sucesso. A Comissão Organizadora agradece a todas as pessoas e entidades que colaboraram, tornaram possível e contribuíram indubitavelmente para o sucesso deste congresso, nomeadamente os patrocinadores e instituições que apoiaram o evento. Uma palavra de reconhecimento agradecimento é devida à Universidade de Coimbra e à SPQ. Por último, um agradecimento a todos os participantes que, com as suas contribuições, garantiram a qualidade do ISySyCat2025.

Mais informações sobre o evento encontram-se disponíveis na página web do congresso (isysycat2025.events.chemistry.pt). Fica desde já o convite à participação na sétima edição do congresso, a ter lugar no mesmo local, entre 31 de agosto e 3 de setembro de 2027.

>

A Comissão Organizadora

isysycat2025@chemistry.pt

22nd International Conference on Carbon Dioxide Utilization (ICCDU 2025)

A série de conferências internacionais sobre utilização de dióxido de carbono (*International Conference on Carbon Dioxide Utilization*, ICCDU) arrancou em Nagoya (Japão) em 1991 e, 34 anos mais tarde, entrou pelas portas do Instituto Superior Técnico (IST) de 23 a 27 de junho deste ano como 22nd *International*

Conference on Carbon Dioxide Utilization (ICCDU 2025) pela mão de Carla Costa Pinheiro (*Chair*), Professora do Departamento de Engenharia Química do IST e investigadora do Centro de Química Estrutural e de Ana Nunes (*Co-Chair*), Professora do Departamento de Engenharia Química da NOVA FCT e investigadora do

LAQV-REQUIMTE. A conferência teve o suporte institucional das seguintes entidades: Ordem dos Engenheiros, SPQ, *Royal Society of Chemistry*, EuChemS, Turismo de Portugal, Academia das Ciências de Lisboa, NOVA FCT e IST. Contou ainda com o CO₂ Value Europe como parceiro e com os seguintes patrocinadores: GALP, Total Energies, c5Lab, Elsevier, NET4CO₂, AIMPLAS, Pastéis de Belém, Natex, Resibras, Adega de Borba e a Repsol.

Sob o tema “CO₂ para uma Economia Circular”, e em linha com as edições anteriores, a 22.^a ICCDU reuniu



Banner da conferência à entrada do IST. © João Azevedo

em Lisboa cerca de 300 participantes, 80 deles estudantes, de 31 países que trocaram conhecimento sobre tecnologias de captura, utilização e armazenamento de CO₂, assim como abordagens inovadoras capazes de acelerar a transição para uma economia circular do carbono. Nesta edição foram 10 os tópicos abordados nas várias sessões paralelas: Captura e mineralização de CO₂; Conversão biológica de CO₂; Conversão foto- e eletrocatalítica de CO₂; Conversão de CO₂ assistida por plasma; Conversão termocatalítica de CO₂; CO₂ e hidrogénio verde para uma economia circular de carbono; Aplicações de descarbonização industrial; Captura e conversão integrada de CO₂; Utilização não reativa de CO₂; e Sustentabilidade e políticas públicas. A conferência contou com oito palestras plenárias, 14 apresentações convidadas e 20 *keynotes*, para além de uma palestra de boas-vindas, um painel de discussão e um *workshop*. Foram ainda apresentadas 124 comunicações orais e 65 comunicações em painel. Além disso, a conferência contou com uma agenda social variada, incluindo uma *sunset gathering*, uma excursão a Óbidos, e um Jantar de Gala no Pátio da Galé.



Foto de grupo. © João Azevedo

A conferência deu o seu pontapé de saída na Academia das Ciências de Lisboa, com uma Sessão de Boas-vindas por parte de Danielle Ballivet-Tkatchenko, investigadora sénior honorária do CNRS (França) e vencedora do Prémio Aresta 2024, entregue durante a ICCDU deste ano, seguida de um *cocktail* de receção aos participantes que contou com a atuação da Tuna Feminina do Técnico (TFIST).



Carla Pinheiro (esquerda), Michele Aresta (centro) e Danielle Ballivet-Tkatchenko (direita) durante a Sessão de Abertura na Academia das Ciências. © João Azevedo

A sessão de abertura da conferência decorreu na manhã da terça-feira, no IST, e contou com as intervenções de Carla Costa Pinheiro, Ana Nunes, Chunsang Song (*Chair* do Comité Científico Internacional), Miguel Prazeres (em representação do Presidente do IST), José Paulo Santos (em representação do Presidente da NOVA FCT) e Jean Barroca (Secretário de Estado da Energia).

Durante o Jantar de Gala no Pátio da Galé, onde a companhia Amalgama apresentou o seu espetáculo “Fado Nosso”, foram entregues os prémios “JCOU-ICCDU Jovem Cientista” e o “Prémio Aresta 2025” a Melissa Bacatelo (c5Lab, Portugal) e Chunshan Song (Universidade de Hong Kong, China), respetivamente.

O programa científico encerrou-se com uma mesa redonda sobre novas tendências na utilização do CO₂ para uma economia circular, moderada por Henrique Matos (IST-Universidade de Lisboa, Portugal) e que contou com a participação de Anabela Santos (Centro Comum de Investigação da Comissão Europeia, Bélgica), Angela Dibenedetto (Universidade de Bari, Itália), Hugo Matias (NET4CO₂, Portugal), Marco Ferraz (Galp, Portugal), Margarida Mateus (c5Lab, Portugal), Pilar Cumplido (AIMPLAS, Espanha) e Peter Styring (Universidade de Sheffield, Reino Unido). A necessidade de mais investigação aplicada, de preferência suportada por fundos públicos por meio de concursos competitivos, para promover a implementação das tecnologias de CCUS a nível industrial foi identificada como chave para o futuro.

Na cerimónia de encerramento foram ainda entregues os prémios de melhores apresentações orais e em painel. Os vencedores das melhores comunicações orais foram Margarita Poderyte (Universidade de Copenhaga, Dinamarca), Rafael Castro-Amoedo (Instituto Superior Técnico, Portugal) e Anju Sobhana (Universidade de Amesterdão, Holanda). Os prémios



Sessão de abertura da conferência. © João Azevedo

para melhores comunicações em painel foram atribuídos a Sergio Dorado-Alfaro (Universidade Autónoma de Madrid, Espanha), Daniel Sousa (Universidade de Lisboa, Portugal) e José Antonio Abarca (Universidade de Cantabria, Espanha).

Mais informações acerca da 22.ª ICCDU, nomeadamente o programa detalhado, podem ser encontradas em iccd2025.events.chemistry.pt.

O próximo ICCDU terá lugar em Boulder (Estados Unidos da América), em junho de 2026, e promete continuar com o sucesso das edições anteriores, consolidando-se como umas das mais importantes conferências globais na área da valorização do dióxido de carbono. A 23.ª edição da conferência

Mesa-redonda sobre novas tendências na utilização do CO₂ para uma economia circular, moderada por Henrique Matos. © João Azevedo

será organizada pelo Laboratório Nacional de Energia Renovável (NREL), pela Universidade de Colorado Boulder (CU Boulder) e pelo Instituto de Energia Renovável e Sustentável (RASEI).

>

Carmen Bacarizamaria.rey@tecnico.ulisboa.pt

>

Ana Nunesavn07929@fct.unl.pt

>

Carla Pinheirocarla.pinheiro@tecnico.ulisboa.pt

ICCT2025 – 27th IUPAC International Conference on Chemical Thermodynamics

A Faculdade de Ciências da Universidade do Porto (FCUP) acolheu, pela segunda vez, a 27.ª Conferência Internacional da IUPAC em Termodinâmica Química (ICCT2025), um dos mais prestigiados Encontros científicos mundiais na área da Termodinâmica Química.

O evento decorreu entre os dias 20 e 24 de julho de 2025, no Polo do Campo Alegre da Universidade do Porto, em Portugal. A organização esteve a cargo da FCUP, em colaboração com a SPQ.

A ICCT é uma série de conferências promovida pela *International Association of Chemical Thermodynamics* (IACT). A edição de 2025 contou com a participação ativa de várias instituições parceiras, incluindo membros da Universidade do Porto – CIQUP | IMS, da Universidade de Aveiro – CICECO, e do Instituto Politécnico de Bragança – CIMO.

Esta conferência, que já vai na 27.ª edição, reúne especialistas de topo em áreas como termodinâmica molecular, físico-química, energia, materiais, soluções e processos industriais. O evento realiza-se sob a égide da IUPAC, uma entidade de referência global



Christoph Schick, Prémio "Rossini Lecture Award" - Luís Belchior Santos.

que define normas e promove o avanço da Química.

O programa da ICCT2025 destacou os mais recentes avanços nesta área fundamental da ciência, que sustenta desenvolvimentos em domínios cruciais como baterias, hidrogénio verde, captura e valorização de carbono, novos materiais, entre muitos outros temas emergentes. De salientar a participação de especialistas como Christoph Schick, professor e investigador da Universidade de Rostock, Alemanha,

conhecido pelo seu trabalho na calorimetria de varrimento rápido; Quan Shi, da Academia Chinesa de Ciências, que estuda a termodinâmica química de materiais energéticos; Lourdes Vega (Universidade Khalifa, Emirados Árabes Unidos), especialista em CO₂ e hidrogénio, que lidera o Centro de Investigação e Inovação em CO₂ e Hidrogénio (RICH); Taichi Abe, do Instituto Japonês de Ciências dos Materiais; Eric May, da *The University of Western Australia*; Mirjana Minceva, da *Technical University of Munich*, Alemanha; e Frederico Tavares, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil.

A presença de líderes académicos e industriais reforçou o papel da conferência como um fórum essencial para o progresso da termodinâmica química e contou com várias parcerias onde se destacam as empresas Paralab | Netzsch, Soquímica | Mettler Toledo, Norleq | TA Instruments, Specanalítica | Setaram, MTB | Anton Paar e Gravimeta | Linseis.

O ICCT2025 contou com mais de 230 participantes, provenientes de 28 países e cinco continentes. Entre os momentos de maior destaque, salientou-se a lição plenária proferida pelo Professor Christoph Schick, intitulada *“Fast scanning calorimetry and its contribution to chemical thermodynamics”*. Esta intervenção marcou a atribuição do prestigiado *Rossini Lecture Award 2025*, uma distinção de grande relevância conferida pela IACT, em reconhecimento de contribuições científicas excecionais no domínio da termodinâmica química.

A sessão de comunicações em painel do ICCT2025 foi especialmente dedicada à Professora Margarida Bastos (FCUP | CIQUP), reconhecida internacionalmente pelo seu notável contributo para a área da biotermodinâmica e da microcalorimetria.

Durante o jantar oficial da conferência, que teve lugar nas emblemáticas Caves Ferreirinha, em Vila Nova de Gaia, foram anunciados os vencedores das cinco melhores comunicações em painel apresentadas nesta sessão de homenagem.

O evento foi organizado pelos docentes da FCUP e investigadores do CIQUP-IMS, Prof. Luís Belchior Santos e Doutor José Carlos Costa, e ainda por uma vasta equipa oriunda do CIQUP, CICECO e CIMO.

Mais informações acerca do evento disponíveis em icct2025.events.chemistry.pt.

>

Luís Belchior Santoslbsantos@fc.up.pt

Jantar nas Caves Ferreirinha.



Parte do Comité organizador da Sessão de Comunicações em Pannel nos jardins da FCUP.



Foto de Grupo do ICCT2025 (FCUP | CIQUP).



Homenagem à Professora Margarida Bastos (FCUP | CIQUP).

21st European Symposium on Fluorine Chemistry - ESFC LISBON

A 21.^a edição do *European Symposium on Fluorine Chemistry* - ESFC LISBON, realizou-se em Portugal, pela primeira vez, entre 3 e 9 de agosto 2025 no Centro de Congressos de Lisboa (CCL), com organização da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade NOVA de Lisboa | NOVA FCT e LAQV-REQUIMTE, em colaboração com a Sociedade Portuguesa de Química (SPQ). Este simpósio reúne especialistas da indústria e da academia de todo o mundo, tendo sido realizado pela primeira vez em Munique, em 1965. O ESFC tem lugar de três em três anos na Europa e o respetivo programa científico abrange uma vasta gama de temas relacionados com a química do flúor e as suas aplicações tecnológicas.

O ESFC LISBON reuniu mais de 300 pessoas provenientes do meio académico, de institutos de investigação e da indústria. O programa científico abordou uma grande diversidade de temas em química do flúor, tanto fundamental como aplicada, com contributos da química-física e química teórica, assim como das áreas das tecnologias fluoradas, dos processos sustentáveis, da biomedicina, da ciência dos materiais, e das substâncias per- e polifluoroalquílicas (PFAS), contaminantes emergentes designados por “químicos eternos”. Realizaram-se sete sessões plenárias, seis sessões *keynotes*, 55 orais convidadas, 97 apresentações orais, 15 apresentações *Flash* (selecionadas das comunicações em painel) e 84 comunicações em painel, que proporcionaram um espaço dinâmico para a partilha de conhecimento e para o debate de ideias inovadoras.

Inserido no ESFC LISBON, decorreu no dia 5 de agosto, o Painel de Discussão Público sobre PFAS, organizado conjuntamente pelos projetos ALERT-PFAS (Interreg SUDOE), LIFE4F-GASES (Programa LIFE) e MAR2PROTECT (Horizon Europe), que reuniu especialistas, entidades públicas e líderes da indústria para abordar os desafios urgentes colocados pela contaminação por PFAS. O painel de discussão esteve estruturado em dois blocos distintos, refletindo tanto as preocupações industriais como os interesses públicos mais amplos. O primeiro bloco, com participação da Direção-Geral do Ambiente (DG-ENV) da Comissão Europeia, incidiu sobre os quadros políticos, as respostas regulamentares e as estratégias de governação climática destinadas a mitigar os impactos das PFAS. O segundo bloco explorou abordagens inovadoras para o desenvolvimento de alternativas sustentáveis às PFAS que equilibrem as necessidades industriais com as prioridades ambientais e de saúde humana.

No seguimento do Painel de Discussão sobre PFAS,



na tarde de 5 de agosto, foi realizada uma sessão dedicada a Oportunidades de Financiamento, onde foi criado um Espaço Aberto de Investigação, que ofereceu uma plataforma onde foram apresentadas iniciativas em curso, promovendo potenciais parcerias e *networking*, com base em informações dos próximos editais e formas de financiamento dos principais programas da União Europeia. Simultaneamente, uma série de atividades orientadas para o público foram realizadas no *Open Fun Hall*, com jogos, cinema e experiências projetadas para impactar públicos de todas as idades. Por meio de explorações interativas, essas atividades tiveram como objetivo inspirar a próxima geração de investigadores.

O ESFC LISBON 2025 reuniu 314 participantes provenientes de seis continentes, refletindo a verdadeira dimensão global do simpósio e das temáticas abordadas. A distribuição geográfica mostrou uma forte presença europeia (51%), seguida da Ásia (20%), África (13%), América do Norte (8%), América do Sul (5%) e Oceânia (3%). Entre os países mais representados destacaram-se a Alemanha (18%), Portugal (10%), França (9%), Japão (9%), Reino Unido (9%), Estados Unidos (5%), Polónia (5%), China (4%), Espanha (4%), Itália (3%), Canadá (3%) e República da Coreia (3%), com os restantes 21% distribuídos por outras nacionalidades. Relativamente ao perfil dos participantes, 39% pertenciam ao meio académico e institutos de investigação, 42% eram estudantes, e 19% eram não académicos, demonstrando um equilíbrio entre ciência e indústria. A presença não académica foi particularmente relevante, nomeadamente com a participação da ERP Portugal, FEUGA, PFASUIKI, F-SELECT, DEXYAN, COMEALL, MAGRITEK, UNICAM, APRIA, AMBIGROUP RECICLAGEM, EXFLUOR, AGC, VEOLIA, BASF, WONDERSTATUS, MTB, ÁGUAS E ENERGIA DO PORTO, CHEMISTRY EUROPE, ELSEVIER,

JOURNAL OF FLUORINE CHEMISTRY, FLUORINOVA, LABORSPIRIT, THIEME, GRADIVA e ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY, que contribuíram para reforçar a ponte entre a investigação científica, a aplicação prática no setor industrial e a sociedade.

Mais informações acerca do Encontro podem ser encontradas em 21-esfc-lisbon.events.chemistry.pt.

>

Ana B. Pereiroanab@fct.unl.pt

>

Srdana Kolakovics.kolakovic@fct.unl.pt

>

João M. M. Araújojmmda@fct.unl.pt

>

Joana C. Bastosjc.bastos@campus.fct.unl.pt

Prémio Europeu de Química Sustentável 2025

Criado em 2010, o Prémio Europeu de Química Sustentável (ESCA) reconhece indivíduos ou equipas cujo trabalho tenha feito avançar significativamente a Química Sustentável. Os destinatários são selecionados pela Divisão de Química Verde e Sustentável (DGSC) e anunciados na conferência bienal *Green & Sustainable Chemistry* da EuChemS.

O Prémio Europeu de Química Sustentável 2025 foi atribuído a Michael George, Peter Licence e Martyn Poliakoff, em reconhecimento das suas contribuições para o domínio da Química Sustentável. O prémio foi entregue na 7.ª Conferência EuChemS sobre Química Verde e Sustentável, realizada em Budapeste, Hungria, entre 1 e 5 de junho de 2025.

Esta distinção destaca o seu trabalho inovador sobre meios reacionais alternativos, que proporcionam soluções práticas para os principais desafios ambientais, e reforça o papel crucial da química no avanço da sustentabilidade. Para além da sua investigação, Michael George, Peter Licence e Martyn Poliakoff têm



demonstrado uma liderança notável na educação e no envolvimento do público, inspirando tanto a próxima geração de cientistas como a comunidade em geral.

Mais detalhes relacionados com este Prémio disponíveis em euchems.eu/divisions/green-and-sustainable-chemistry-2/publications-reports-other-references.

>

Bruno Machadobrunofm.feup@gmail.com

Medalha de Ouro Europeia em Química 2026 Atribuída a Marc Koper

Marc Koper, especialista em química de superfícies e catálise na Universidade de Leiden, Países Baixos, recebeu a Medalha de Ouro EuChemS em Química 2026. Este prémio, concedido bianualmente, reconhece as realizações excecionais de um cientista no campo da Química na Europa.

A sua investigação em Leiden centra-se em aspetos fundamentais da eletrocatalise, eletroquímica teórica e computacional e ciência eletroquímica de superfícies, sobretudo relacionadas com energias renováveis e Química.

Mais informações acerca deste prémio encontram-se disponíveis em euchems.eu/awards/euchems-gold-medal.



>

Bruno Machadobrunofm.feup@gmail.com

Prémio EuChemS Lecture 2024 Atribuído a **Maria Cuartero**

Todos os anos são premiados os principais resultados atingidos por um cientista júnior que trabalha no campo da Química num país com uma organização pertencente à EuChemS. O Prémio EuChemS Lecture 2024, que promove a cooperação científica entre químicos europeus, foi atribuído a Maria Cuartero.

Maria Cuartero iniciou a sua carreira de investigação independente em 2018 como bolseira Marie Curie no *Royal Institute of Technology* (KTH), em Estocolmo, Suécia. Em 2020 foi nomeada Professora Auxiliar e recebeu tanto a bolsa sueca *VR Starting Grant* como a bolsa *ERC Starting Grant*. Atualmente, ocupa o cargo de Professora na UCAM (Espanha) e no KTH. Maria Cuartero lidera duas equipas de investigação que colaboram em vários projetos nacionais e europeus.

A sua investigação em deteção de iões recebeu reconhecimento dentro da comunidade científica, particularmente pelas suas contribuições para o desenvolvimento de elétrodos seletivos de iões e suas aplicações práticas. O seu trabalho inclui avanços em conceitos de camada fina para elétrodos



voltamétricos seletivos de iões e explora aspetos chave do desenvolvimento de sensores (bio)químicos, incluindo miniaturização e melhorias na sensibilidade e portabilidade.

Mais informações acerca deste prémio disponíveis em euchems.eu/awards/lecture-award.

>

Bruno Machado

brunofm.feup@gmail.com

Prémio EuChemS Walter Thiel Atribuído a Sandra Luber

Sandra Luber, da Universidade de Zurique, Suíça, foi homenageada com o Prémio Walter Thiel da EuChemS em Química Computacional e Teórica pela Divisão de Química Computacional e Teórica da EuChemS. Sandra Luber recebeu o prémio devido às suas contribuições excecionais para a química computacional.

Walter Thiel foi um dos principais químicos teóricos europeus do final do século XX e início do século XXI. O prémio, concedido bienalmente, reconhece a contribuição científica notável de um jovem investigador de um país afiliado à EuChemS. O prémio é patrocinado pelo *Max Planck Institute for Coal Research*, Mülheim an der Ruhr, Alemanha, pela Sociedade Alemã de Química, e pela *Chemistry Europe*. Sandra Luber recebeu o prémio na Conferência Europeia de Química Computacional e Teórica (EuChemS CompChem 2025) que decorreu em 15 de setembro de 2025, em Nápoles, Itália.

A investigação de Sandra Luber centra-se no desenvolvimento de métodos teóricos em química, (bio)física e ciência dos materiais, com ênfase em abordagens derivadas da mecânica quântica. As suas simulações permitem uma visão atomística detalhada de sistemas complexos e a exploração de processos desafiantes. O seu trabalho recente tem-se centrado



principalmente na descrição realista (dinâmica) de grandes sistemas (em fase condensada), na exploração de estados excitados e sua dinâmica, na catálise homogénea e heterogénea (foto/eletro), na espectroscopia e na aprendizagem automática, bem como na estrutura eletrónica precisa.

Mais informações acerca deste prémio disponíveis em euchems.eu/divisions/computational-chemistry-2/walter-thiel-award.

>

Bruno Machado

brunofm.feup@gmail.com

Qual a Origem dos Vestígios de Arsénio Presentes na Chuva?

O arsénio, um elemento tóxico de origem natural e antropogénica, atinge os ambientes de superfície através do ciclo atmosférico e da deposição seca e húmida. A biometilação volatiliza o arsénio para a atmosfera e o ciclo de deposição faz com que este volte à superfície, afetando os sistemas solo-planta. A especiação química do arsénio depositado é importante para compreender o seu processamento posterior nos solos e a sua biodisponibilidade. Os mecanismos de transporte e as fontes das espécies de arsénio são ainda pouco conhecidos, uma vez que a maior parte da investigação tem-se focado no arsénio presente nas águas subterrâneas e nos solos.

E. S. Breuninger, J. Tolu, L. H. E. Winkel (*Eawag, Swiss Federal Institute of Aquatic Science and Technology, Dübendorf*, e *ETH Zurich, Suíça*) e colegas otimizaram métodos para detetar arsénio em concentrações extremamente baixas. Estes investigadores encontraram vestígios do elemento em aerossóis, nuvens e água da chuva, em medições realizadas no Observatório do *Pic du Midi*, nos Pirenéus, em França, e que se situa a 2877 m acima do nível médio das águas do mar. Esta estação está maioritariamente exposta à troposfera livre, o que permite medições que não sejam, em grande parte, afetadas por fontes locais de poluição. Os investigadores identificaram fontes terrestres e marinhas de diferentes espécies de arsénio. As suas descobertas revelam que as nuvens contêm concentrações superiores de arsénio por comparação com a água da chuva, grande parte das quais tem origem em processos biológicos naturais como o metabolismo de bactérias, algas ou plantas.

Até agora, pensava-se que as atividades humanas,



Crédito: ChemistryViews

como a exploração mineira, a fundição de metais não ferrosos, os aterros sanitários e a queima de combustíveis fósseis eram as principais fontes de arsénio atmosférico. No entanto, em algumas amostras de nuvens, os compostos metilados constituíam a maioria do arsénio detetado, sugerindo que os processos biológicos desempenham um papel mais importante na distribuição global do arsénio atmosférico do que se pensava anteriormente. Por conseguinte, os investigadores recomendam que nos modelos seja tida em maior consideração a influência dos processos biológicos no ciclo global do arsénio.

Fontes

Where Do Traces of Arsenic in Rain Come From?, chemistryviews.org/where-do-traces-of-arsenic-in-rain-come-from/ (acedido em 12/01/2025).

E. S. Breuninger, J. Tolu, F. Aemisegger, I. Thurnherr, S. Bouchet, A. Mestrot, R. Ossola, K. McNeill, D. Tukhmetova, J. Vogl, B. Meermann, J. E. Sonke, L. H. E. Winkel, *Nat. Commun.* **2024**, 15, 9623. DOI: 10.1038/s41467-024-53974-z.

>

Ana Paula Esteves

aesteves@quimica.uminho.pt

Desracemização de Haletos de Alquilo Promovida por Catalisador Ativado por Luz

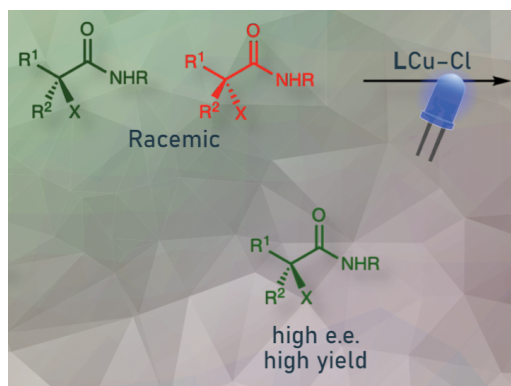
A desracemização constitui uma estratégia emergente e promissora para a obtenção de compostos enantiomericamente enriquecidos, na qual ambos os enantiómeros de uma mistura racémica são convertidos num único enantiómero, geralmente com recurso a catalisadores ativados por luz. Apesar de existirem evidências sólidas da viabilidade deste processo, persistem desafios significativos – nomeadamente, a dificuldade em quebrar ligações carbono–heteroátomo, para além das mais comuns ligações C–H ou C–C – com vista à síntese de uma ampla gama de compostos enantiomericamente enriquecidos, incluindo aqueles com

estereocentros tetrassubstituídos.

P. Liu (Universidade de Pittsburgh, EUA), G. C. Fu (Instituto de Tecnologia da Califórnia (CalTech), EUA) e colegas utilizaram um catalisador quiral de cobre preparado *in situ* a partir de compostos comerciais (CuX e (R)- ou (S)-DTBM-SEGPHOS) para obter a desracemização fotoinduzida de haletos de alquilo terciários (e secundários) por clivagem da ligação carbono–halogéneo.

O catalisador contém um centro de cloreto de cobre(I) e uma fosfina quiral volumosa como ligando. A irradiação deste complexo conduz a um complexo

de estado excitado de cobre(II), por transferência de um único eletrão, com um haleto de alquilo terciário, promovendo a quebra da ligação carbono-halogéneo, com a formação de um radical orgânico. A transferência de átomos de halogéneo do complexo de cobre(II) para



Crédito: ChemistryViews

o radical orgânico produz haleto de alquilo enantioenriquecido, por “orientação” do ligando volumoso de fosfina quiral, e regenera o catalisador de cobre(I).

Os investigadores verificaram que o método funciona bem com uma gama alargada de haleto de alquilo, originando rendimentos e enantioselectividade elevados.

Fontes

Light-Activated Catalyst Resets Carbon-Halogen Bonds to Turn Racemates into Enantiomer-Enriched Product, chemistryviews.org/light-activated-catalyst-resets-carbon-halogen-bonds-to-turn-racemates-into-enantiomer-enriched-products (acedido a 10/05/2025).

F. Zhong, R. Li, B. K. Mai, P. Liu, G. C. Fu, *Nature* **2025**, 640, 107-113. DOI: 10.1038/s41586-025-08784-8.

>

Ana Paula Esteves

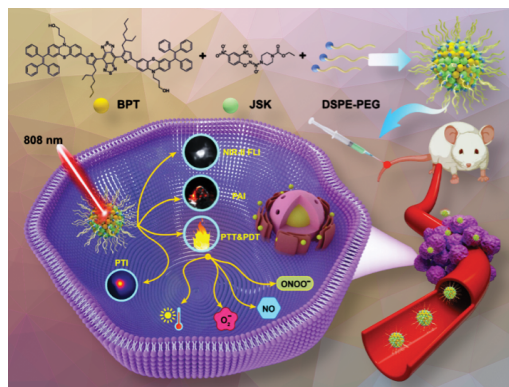
aesteves@quimica.uminho.pt

Nanopartículas Fluorescentes na Imagiologia e na Terapia de Precisão de Tumores

B. Zhang (Southern University of Science and Technology, China) e colegas desenvolveram uma nova molécula que possui emissão induzida por agregação (AIE, *aggregation-induced emission*) denominada BPT. Ao integrar unidades de fenotiazina, uma estrutura tricíclica não-planar fortemente eletrodadora, num núcleo de tetrafeniletileno e acoplá-lo a um aceitador benzobistiadiazol (BBTD), as nanopartículas BPT resultantes apresentam emissão de fluorescência NIR-II a 1083 nm (rendimento quântico: 1,53%), 63% de eficiência de conversão fototérmica, capacidade de imagem fotoacústica e geração de espécies reativas de oxigénio tipo I ($O_2^{\cdot -}$).

Posteriormente, a equipa de investigação co-encapsulou BPT com o dador de óxido nítrico (NO) $O_2^{\cdot -}$ -(2,4-dinitrofenil)-1-[(4-etoxicarbonil) piperazin-1-il] diazen-1-íó-1,2-diolato (JSK) em nanopartículas de 1,2-diestearoil-sn-glicero-3-fosfo-etanolamina-metoxipoli(etilenoglicol) 2000 (DSPE-PEG2000). Estas nanopartículas (NPs) JSK-BPT produzem $O_2^{\cdot -}$, NO e ONOO $^{\cdot -}$ após irradiação, aumentando os efeitos fototóxicos. *In vitro*, as NPs JSK-BPT erradicaram a maioria das células tumorais em baixas concentrações, sob exposição a laser de 808 nm. Num modelo de rato com tumor da mama 4T1, as NPs BPT permitiram a obtenção de imagens multimodais de alta resolução da vasculatura e dos locais do tumor. Sob a orientação da imagiologia multimodal, uma dose única de NPs JSK-BPT combinada com irradiação laser levou à ablação completa do tumor.

Este trabalho amplia as capacidades de emissão



Crédito: ChemistryViews

NIR-II dos materiais AIE e demonstra uma plataforma multifuncional para imagiologia e fototerapia integradas, abordando os principais desafios no tratamento de precisão de tumores e na seleção de alvos microambientais.

Fontes

Fluorescent Nanoparticles Enable Precise Tumor Imaging and Therapy, chemistryviews.org/fluorescent-nanoparticles-enable-precise-tumor-imaging-and-therapy (acedido a 19/04/2025).

Z. Xu, M. Lv, J. Yang, T. Li, J. Lv, J. Li, H. Xiao, Y. Yang, S. Zhou, X. Tan, L. Cheng, H. Guo, L. Xi, P.-L. Shao, B. Zhang, *Aggregate* **2025**, 6, e70040. DOI: 10.1002/agt2.70040.

>

Ana Paula Esteves

aesteves@quimica.uminho.pt

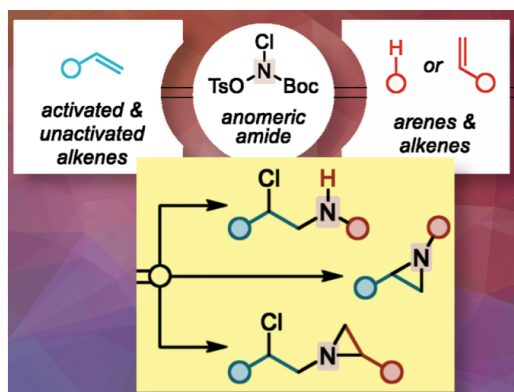
Acoplamento Amínico *One-Pot* de Alcenos e Arenos

Apesar da importância das reações de acoplamento cruzado na formação de ligações C-N, as abordagens de acoplamento amínico, nas quais dois fragmentos são “ligados” diretamente no heteroátomo, representam uma estratégia retrosintética raramente explorada.

Frank Glorius (Westfälische Wilhelms-Universität Münster, Alemanha) e colegas desenvolveram uma reação *one-pot* de acoplamento amínico alceno-areno e alceno-alceno, multicomponente e regioseletiva, para a síntese de aminas secundárias e aziridinas. A equipa de investigação concebeu e sintetizou um precursor, uma amida anomérica (terc-butilcloro(tosiloxi)carbamato), para atuar como uma N-haloamina eletrofílica forte. Este composto promove reações de cloroaminação suaves, seletivas e sem catalisador, introduzindo simultaneamente um precursor de nitreno mascarado. Para além disso, é de fácil manuseamento e pode ser armazenado durante semanas a -20 °C.

Este acoplamento combina três etapas: primeiro, a amida anomérica reage com um alceno para formar, de modo regioseletivo, um intermediário 1,2-cloroamina. Em seguida, a cloroamina é submetida a desproteção catalisada por ácido. Finalmente, este composto reage via inserção de C(sp²)-H ou da cicloadição [2+1] para agregar fragmentos de alcenos e arenos em produtos contendo nitrogénio. Um passo chave para a otimização do processo é a adição tardia de hexafluoroisopropanol (HFIP), que evita a decomposição da amida anomérica antes da formação do intermediário cloroamina, permitindo a síntese do produto de acoplamento com um rendimento de 91% sob condições suaves.

Devido à simplicidade do protocolo e das unidades reativas necessárias, os investigadores utilizaram a



Crédito: ChemistryViews

experimentação de alto rendimento (HTE, do inglês *high-throughput experimentation*), em conjunto com condições em escala real, para testar de forma rápida e eficiente uma ampla variedade de combinações moleculares e condições reacionais, com o objetivo de mapear os limites da reatividade. O método demonstrou ser robusto, tolerante a grupos funcionais e aplicável ao acoplamento entre alcenos, oferecendo uma via eficaz para a síntese de compostos contendo grupos amina.

Fontes

One-Pot Aminative Coupling of Alkenes and Arenes, chemistryviews.org/one-pot-aminative-coupling-of-alkenes-and-arenes (acedido em 18/12/2024).

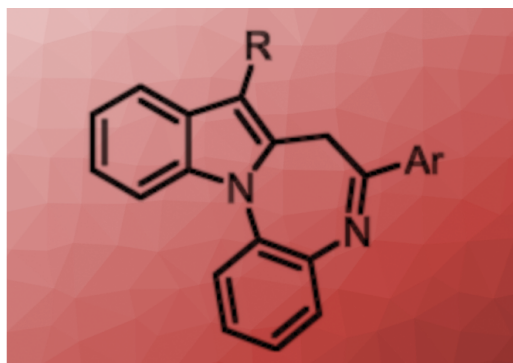
C. Stein, J. L. Tyler, J. Wiener, F. Boser, C. G. Daniliuc, F. Glorius, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, e202418141. DOI: 10.1002/anie.202418141.

>

Ana Paula Esteves

aesteves@quimica.uminho.pt

Síntese em Cascata de Benzodiazepinas Fundidas com Indole



Crédito: ChemistryViews

As benzodiazepinas são farmacóforos de grande relevância, com atividades biológicas distintas que atuam no sistema nervoso central, sendo amplamente utilizadas no tratamento da ansiedade. Diversas metodologias têm sido desenvolvidas para a sua síntese. Entre os derivados de benzodiazepina, destacam-se as estruturas fundidas com indole, uma classe com potencial relevante na descoberta de novos fármacos. Neste contexto, as reações em cascata, capazes de formar múltiplas ligações químicas num único passo, revelam-se particularmente atrativas para a síntese eficiente deste tipo de compostos.

T. Akiyama (Universidade de Gakushuin, Tóquio, Japão) e colegas desenvolveram um método, por reação em cascata, para a síntese fotocatalítica de benzodiazepinas fundidas com indole (estrutura geral do produto na imagem). A equipa de investigação fez a reação entre diferentes α -acetoxi aril cetonas com uma variedade de o-indoloanilinas na presença de 10-fenilfenotiazina

como fotocatalisador e Na_2CO_3 como base. As reações foram realizadas em acetonitrilo, à temperatura ambiente e sob luz LED de 370 nm.

Nestas condições reacionais, as benzodiazepinas fundidas com indole pretendidas foram obtidas com rendimentos moderados a elevados. A equipa de investigação propõe um mecanismo de reação que envolve uma redução de um único eletrão da α -acetoxi aril cetona para gerar um radical acilo. Este radical sofre uma adição ao indole, seguida de uma oxidação de um único eletrão, desprotonação e ciclo desidratação, culminando na formação do produto desejado. Globalmente, o protocolo é eficiente e ambientalmente sustentável,

permitindo o acesso a benzodiazepinas a partir de reagentes facilmente acessíveis.

Fontes

Cascade Synthesis of Indole-Fused Benzodiazepines, chemistryviews.org/cascade-synthesis-of-indole-fused-benzodiazepines (acedido a 18/01/2025).
T. Oishi, T. Uchikura, T. Akiyama, *Chem. Commun.* **2025**, 61, 2576–2579. DOI: 10.1039/D4CC05755D.

>

Ana Paula Esteves

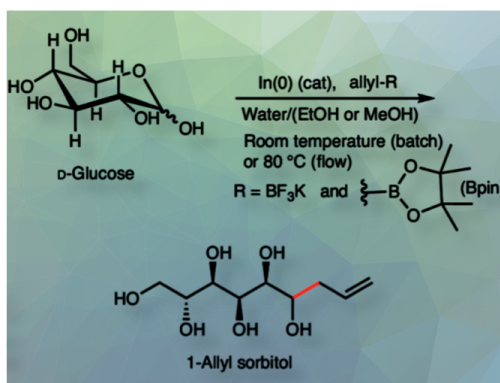
aesteves@quimica.uminho.pt

Alilação Sustentável de Hidratos de Carbono: Nova Via para Derivados Industriais de Sorbitol

Os hidratos de carbono representam uma matéria prima de origem biomassa abundante, económica e renovável, com elevado potencial para se estabelecerem como elemento central na produção sustentável de compostos químicos de valor acrescentado. No entanto, persistem limitações na disponibilidade de métodos escaláveis e ambientalmente sustentáveis que permitam a sua valorização eficaz. Um exemplo relevante é o 1-alil sorbitol, um precursor essencial do aditivo Millad NX 8000, amplamente utilizado para conferir maior transparência e resistência térmica aos plásticos de polipropileno. Embora este aditivo seja produzido anualmente em escala de várias toneladas, o processo de síntese requer quantidades superestequiométricas de estanho, o que compromete a sustentabilidade do método.

K. F. Jensen (*Massachusetts Institute of Technology* – MIT, EUA), S. E. Denmark (*University of Illinois at Urbana-Champaign*, EUA) e colaboradores desenvolveram um método catalítico sustentável para a alilação de hidratos de carbono não protegidos, em meio aquoso, com vista à produção de 1-alil sorbitol. O processo utiliza índio metálico reciclável como catalisador e reagentes benignos à base de boro, nomeadamente o ácido alilborónico e o seu éster de pinacol (alilBpin), como doadores de grupo alilo. Recorrendo a esta metodologia, a equipa conseguiu a alilação eficiente de aldo-hexoses, amino-hexoses, cetohexoses e aldopentoses, sob condições suaves, e com rendimentos elevados. O processo foi posteriormente otimizado com recurso a *machine learning*, permitindo a sua implementação em síntese de fluxo contínuo, o que o torna particularmente promissor para aplicações industriais.

A reutilização do catalisador de índio e a natureza ambientalmente benigna dos reagentes de alilboro representam uma melhoria significativa face ao processo atual, baseado em brometo de alilo e em quantida-



Crédito: ChemistryViews

des estequiométricas de estanho metálico, os quais geram resíduos tóxicos e pouco compatíveis com os princípios de química sustentável. Tendo em conta o aumento projetado da procura global por polipropileno clarificado – estimado em mais de cinco milhões de toneladas até 2030, o que corresponde a cerca de 40 000 toneladas do aditivo Millad NX-8000 –, esta inovação poderá contribuir significativamente para a redução do impacto ambiental associado a um dos materiais plásticos mais amplamente utilizados.

Fontes

Green Allylation of Carbohydrates: A Tin-Free Route to Industrial Sorbitol Derivatives, chemistryviews.org/green-allylation-of-carbohydrates-a-tin-free-route-to-industrial-sorbitol-derivatives (acedido a 19/04/2025).
T. Adak, T. Menard, M. Albritton, F. Florit, M. D. Burke, K. F. Jensen, S. E. Denmark, *Nature* **2025**, 640, 95–99. DOI: 10.1038/s41586-025-08690-z.

>

Ana Paula Esteves

aesteves@quimica.uminho.pt

GEO-Glass - Geochemical Signatures in Degraded Glass: Implications for Provenance Studies

>

Mafalda Costa

mcosta@uevora.pt

● ● ● Desde o seu desenvolvimento no 3.º milénio a.C., o vidro tem sido utilizado continuamente ao longo da história da Humanidade para produzir objetos utilitários, tais como loiça ou janelas, mas também para criar peças de adorno e até obras de arte. Apesar de ser considerado por muitos como um material simples devido à sua difusão e utilização generalizada, o fabrico do vidro requer conhecimentos avançados sobre matérias-primas e a manipulação das mesmas. O vidro arqueológico preserva evidências químicas da sua génese, bem como das transformações induzidas ao longo do tempo, desde a sua utilização até ao seu enterramento. Baseando-se no princípio de que o vidro herda a impressão digital química das matérias-primas utilizadas no seu fabrico, os estudos de proveniência de vidro utilizam a determinação do conteúdo em elementos-traço e a análise isotópica para identificar não só o local onde o vidro foi fabricado, mas também a localização das fontes de matérias-primas exploradas para a sua produção. Desta forma, pode inferir-se sobre as redes de comércio existentes, tanto de matérias-primas como do vidro.

A degradação do vidro, e a consequente mobilidade dos elementos químicos, pode, por conseguinte, afetar fortemente a precisão e a fiabilidade dos estudos de proveniência.

O projeto GEO-Glass pretende compreender o impacto da degradação do vidro nos estudos de proveniência focando-se na mobilidade dos elementos químicos que o compõem. Amostras de vidro com sinais macroscópicos de degradação do material serão selecionadas de entre coleções de contas de vidro de colar da Idade do Ferro, e documentadas e caracterizadas por microscopia ótica e digital, SEM-EDS e FEG-SEM, espectroscopia de micro-Raman, difração de raios-X, LIBS e LA-ICP-MS. Esta metodologia multi-analítica permitirá identificar a morfologia das camadas de vidro degradado e determinar a sua composição, bem como das fases neoformadas (e.g., calcite, óxidos de ferro e manganês) presentes. Além disso, será realizado o mapeamento 2D e 3D por LA-ICP-MS e LIBS/LA-ICP-MS de forma a compreender quais os elementos que podem ser considerados imóveis durante a degradação do vidro.

● ● ●



>

Ficha Técnica do Projeto

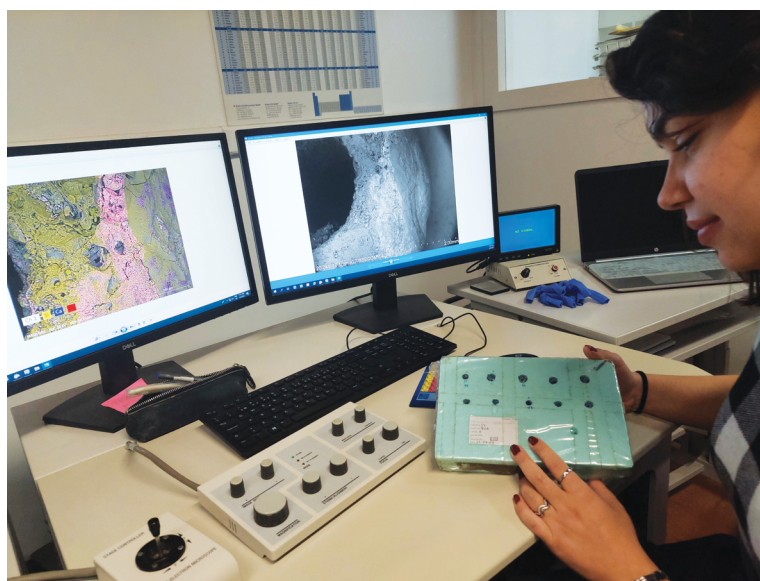
Mafalda Costa

Acrónimo: GEO-GLASS

Financiamento: Fundación “la Caixa”.

Referência: LCF/BQ/PR24/12050013.

Equipa: Universidade de Évora (Laboratório HERCULES) – Mafalda Costa (IR).



Integrated Strategies for the Development of a **Novel Functional Beverage with Sustainable Production Systems**

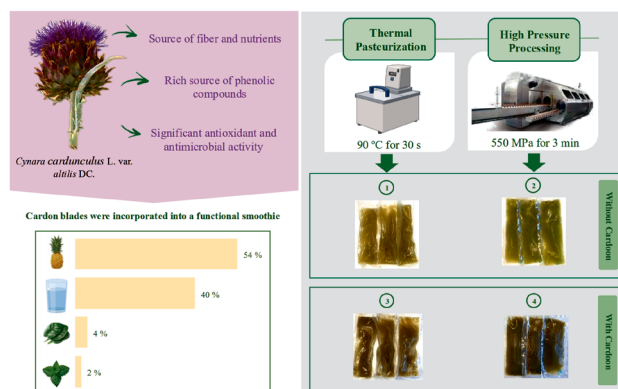
>
Filipa Mandim
 filipamandim@ipb.pt

- **Estratégias Integradas para o Desenvolvimento de uma Nova Bebida Funcional com Sistemas de Produção Sustentáveis.** O aumento da população mundial e a crescente procura por alimentos nutritivos desafiam a sustentabilidade dos sistemas alimentares. O desenvolvimento de estratégias inovadoras que contribuam para o equilíbrio entre a oferta e a procura de recursos do planeta é urgente e extremamente necessário. A implementação de metodologias que promovam a circularidade dos recursos e a sua utilização eficiente pode transformar o setor alimentar e contribuir para a significativa redução de resíduos biológicos.

A *Cynara cardunculus* L., vulgarmente conhecida por cardo, é uma planta endógena nativa dos países da bacia do Mediterrâneo. A produção de cardo concentra-se sobretudo nos países do sul da Europa, nomeadamente Portugal, Grécia, Espanha, Itália e França. Anualmente, são geradas grandes quantidades de subprodutos do cardo, resultando em consequências negativas para o ambiente e no desperdício de material vegetal rico em compostos de interesse. As lâminas do cardo são um dos tecidos vegetais mais abundantemente descartados ou subexplorados. Devido à sua composição fitoquímica interessante, propriedades funcionais e conteúdo rico em fibras, as lâminas de cardo foram utilizadas como ingrediente funcional para desenvolver uma nova bebida (*smoothie*) constituída por abacaxi, espinafres e hortelã, que pudesse fornecer uma ingestão adequada de fibras alimentares e nu-

trientes, garantindo simultaneamente a sua segurança microbiológica. A qualidade, segurança e estabilidade do *smoothie* foram alcançadas através da aplicação do processamento de alta pressão, uma tecnologia emergente de processamento/preservação de alimentos.

A incorporação das lâminas de cardo permitiu não só aumentar o teor de fibras do *smoothie*, mas também a sua estabilidade. Obteve-se uma maior e variada composição fenólica e um aumento das capacidades antioxidante e anti-inflamatória. Estes resultados realçam o potencial das lâminas de cardo para serem utilizadas como ingrediente funcional, contribuindo simultaneamente para a adequada utilização dos recursos nos sistemas agroalimentares no contexto de uma abordagem de desperdício zero.



Autora: Filipa Mandim (CIMO, LA SusTEC, Instituto Politécnico de Bragança, Campus de Santa Apolónia, 5300-253 Bragança, Portugal)

Orientação: Lillian Barros (CIMO, LA SusTEC, Instituto Politécnico de Bragança, Campus de Santa Apolónia, 5300-253 Bragança, Portugal); Celestino Santos-Buelga (Grupo de Investigación em Polifenoles (GIP-USAL), Facultad de Farmacia, Universidad de Salamanca, Campus Miguel de Unamuno, 37007 Salamanca, Espanha).

Instituição Conferente do Grau: Universidad de Salamanca

Programa Doutoral: Farmacia y Salud

Data: 11/03/2024

Repositório: dialnet.unirioja.es/servlet/tesis?codigo=330676

Catalytic C–H Activation of Small Carbon Molecules by Groups 11 and 12 Metals Towards Sustainable Synthesis of Added Value Products

Nuno Reis Conceição

nunoconceicao@tecnico.ulisboa.pt

- **Ativação C–H de pequenas moléculas carbonadas, catalisada por metais dos grupos 11 e 12, visando a síntese sustentável de produtos de valor acrescentado.** Os

complexos de metais de transição têm desempenhado um papel importante como catalisadores na procura de métodos suaves, eficientes, seletivos e sustentáveis para funcionalização de alcanos em produtos de valor industrial. O papel do cobre, ouro e zinco, elementos dos grupos 11 e 12, foi realçado ao longo deste trabalho.

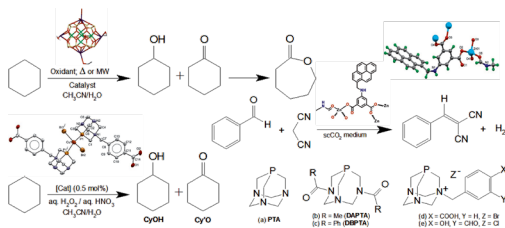
Novos complexos hidrossolúveis de Cu(I) com aminofosfinas derivadas de PTA (1,3,5-triaza-7-fosfa-adamantano) apresentaram uma boa atividade catalítica (20–21% em óleo KA – uma mistura de ciclo-hexanona e ciclo-hexanol em proporções variáveis) na oxidação do ciclo-hexano (CyH) por H_2O_2 em $\text{CH}_3\text{CN}/\text{H}_2\text{O}$, na presença do promotor HNO_3 . Foi revelado um papel interessante desempenhado pela água na seletividade para ciclo-hexanona (Cy'O). Utilizando complexos tetranucleares de Cu(II) contendo aril-hidrazonas de malononitrilo, em condições semelhantes, obtiveram-se rendimentos de 24–26% com ácido 2-pirazinocarboxílico.

O potencial catalítico de fenilsilsesquioxanos de cobre polinucleares *cage-like* foi avaliado na oxidação Baeyer-Villiger (B-V) da ciclo-hexanona e na reação *tandem* de oxidação/oxidação B-V do ciclo-hexano. Foram obtidos rendimentos de 88–100% de ϵ -caprolactona com ácido *m*-cloroperoxibenzóico, com tempos de reação curtos a temperaturas suaves. Foi possível

obter 16–19% de lactona diretamente do ciclo-hexano, ultrapassando a necessidade de isolar o intermediário.

Um novo polímero de coordenação de Zn(II), com centros ácido e base de Lewis, foi testado como catalisador na condensação de Knoevenagel de benzaldeído e malononitrilo em scCO_2 . A mudança de co-solventes polares apróticos (THF) para próticos (etanol e H_2O) resultou numa tendência crescente no rendimento da reação, atingindo-se conversão total com água, mesmo a temperaturas baixas e tempos de reação reduzidos.

Os complexos hidrossolúveis neutros e catiónicos de Au(I) com PTA e derivados não foram particularmente eficientes como catalisadores homogêneos na oxidação suave do ciclo-hexano pelo $t\text{-BuOOH}$ em $\text{CH}_3\text{CN}/\text{H}_2\text{O}$ ($\eta = 0,2\text{--}0,5\%$ em CyOH). No entanto, a sua heterogeneização em suportes de carbono resultou num melhor desempenho catalítico: 0,5–0,6% em CyOH ou 1,4–6,8% em Cy'O. Foi observada uma seletividade interessante para ciclo-hexanol ou ciclo-hexanona, dependendo da natureza do suporte.



Autor: Nuno Pedro Alcântara Barreto Reis da Conceição (CQE-IMS, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa)

Orientação: M. Fátima C. Guedes da Silva (Instituto Superior Técnico); Armando J. L. Pombeiro (Instituto Superior Técnico); Kamran T. Mahmudov (Instituto Superior Técnico)

Instituição Conferente do Grau: Instituto Superior Técnico

Programa Doutoral: *Catalysis and Sustainability* (CATSUS)

Data: 02/05/2024

Repositório: scholar.tecnico.ulisboa.pt/records/GA7R2Pkec-fAogm1mrhgJyXmU7TpvSmFk6lqF

Sistemas Aquosos Bifásicos com Líquidos Iônicos: Novas Abordagens em Bioanálise

>
Maria S. M. Mendes
Inês B. Santana
Mara G. Freire
Francisca A. e Silva

Ionic Liquid-Based Aqueous Biphasic Systems: New Approaches in Bioanalysis. Biomarkers play a crucial role in clinical practice, enabling early diagnosis and personalized treatments. In this context, the effective pre-treatment of human samples is essential to optimize the detection and quantification of biomarkers. This review article addresses the main challenges in clinical biomarker analysis, highlighting ionic liquid-based aqueous biphasic systems (IL-ABS) as an innovative solution for the pre-treatment of human samples. When properly designed, IL-ABS offer several advantages over conventional methods, providing higher efficiency, selectivity, biocompatibility, and cost-effectiveness. Their potential is evidenced by integration with various analytical techniques, improving sensitivity and accuracy in the analysis of biomarkers in urine, blood, and saliva samples. Several studies demonstrate the potential of IL-ABS, establishing them as promising tools in modern medicine.

Os biomarcadores desempenham um papel crucial na prática clínica, permitindo diagnósticos precoces e tratamentos personalizados. Neste contexto, o pré-tratamento eficaz das amostras humanas é fundamental para otimizar a detecção e quantificação de biomarcadores. Este artigo de revisão aborda os principais desafios na análise de biomarcadores clínicos, destacando os sistemas aquosos bifásicos com líquidos iônicos (SAB-LI) como uma solução inovadora para o pré-tratamento de amostras humanas. Quando devidamente projetados, os SAB-LI oferecem diversas vantagens em relação aos métodos convencionais, proporcionando maior eficiência, seletividade, biocompatibilidade e custo-benefício. O seu potencial é evidenciado pela integração com diversas técnicas analíticas, melhorando a sensibilidade e precisão na análise de biomarcadores em amostras de urina, sangue e saliva. Vários estudos demonstram o potencial dos SAB-LI, posicionando-os como ferramentas promissoras na medicina moderna.

1. Introdução

Os biomarcadores clínicos são ferramentas essenciais na medicina moderna, oferecendo uma avaliação objetiva do estado de saúde dos pacientes e complementando a observação de sintomas clínicos [1]. Estes indicadores biológicos incluem enzimas, proteínas e alterações genéticas, e fornecem informações detalhadas sobre processos biológicos e patológicos a nível molecular e celular [2-6]. A monitorização contínua possibilita a detecção precoce de alterações subtis, permitindo intervenções terapêuticas mais eficazes e personalizadas, além de contribuir para a

avaliação da progressão de doenças crónicas e para o acompanhamento da resposta a tratamentos [7]. Contudo, a sua integração na prática clínica enfrenta desafios, como a interpretação dos resultados, que requer consideração do contexto individual de cada paciente, e a necessidade de validação rigorosa em termos de precisão e sensibilidade [8,9]. Para melhorar a detecção, é fundamental o pré-tratamento das amostras, aumentando a sensibilidade e especificidade dos testes [10,11].

A Figura 1 ilustra as principais etapas do processo de

análise de biomarcadores, destacando o pré-tratamento das amostras humanas, especialmente em fluidos como sangue e urina [12]. Este processo visa remover interferentes, concentrar os biomarcadores e melhorar a precisão e sensibilidade das técnicas analíticas adotadas a jusante [12]. A remoção de interferentes evita distorções nos sinais dos biomarcadores, enquanto a concentração dos analitos-alvo permite alcançar os limites de detecção das técnicas analíticas [12,13]. Assim, o pré-tratamento assegura que as análises sejam mais fiáveis, permitindo a detecção de biomarcadores em concentrações mínimas, o que é crucial para diagnósticos precoces e monitorização de doenças [14].

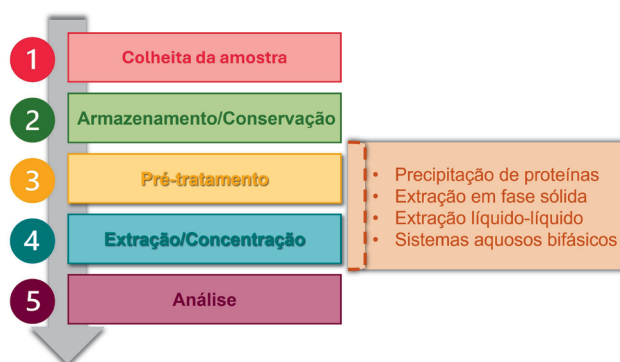


Figura 1 - Principais etapas do processo de análise de biomarcadores, destacando a fase de pré-tratamento e a etapa de extração/concentração da amostra.

A seleção da técnica de pré-tratamento mais adequada depende de vários fatores, como a natureza das amostras, as características dos analitos de interesse (tamanho molecular, polaridade e estabilidade) e a sensibilidade necessária para a análise [15,16]. Amostras com analitos em baixas concentrações exigem métodos sensíveis e eficientes na concentração dos analitos. A técnica de pré-tratamento deve ser compatível com os métodos analíticos subsequentes, como cromatografia líquida acoplada a um método de detecção e espectrometria de massa, para garantir uma preparação adequada das amostras [15,17]. Dada a complexidade das amostras biológicas, a combinação de diferentes técnicas de pré-tratamento tem-se mostrado a estratégia mais eficaz, maximizando a eficiência e assegurando resultados precisos e reprodutíveis na análise de biomarcadores [18].

As técnicas mais comuns de pré-tratamento de amostras humanas incluem: (i) precipitação de proteínas, que usa solventes, ácidos ou polímeros para desnaturar e precipitar proteínas, mas pode resultar em perda de analitos e baixa seletividade [19,20]; (ii) extração em fase sólida, que permite a concentração de analitos e remoção de interferentes, mas exige adsorventes específicos que têm um custo elevado e um tempo de vida limitado, além de exigirem

um processo de otimização demorado para a sua seleção [21]; e (iii) extração líquido-líquido, que separa analitos entre duas fases imiscíveis, sendo eficaz na remoção de interferentes, mas com uso de solventes orgânicos e tempos de extração longos [22]. Até ao momento, nenhuma técnica resolve de forma individual e simultânea questões de seletividade, rendimento, custo e impacto ambiental.

Os sistemas aquosos bifásicos (SAB) surgem como uma alternativa promissora face às técnicas convencionais de pré-tratamento, superando desafios contemporâneos na extração e purificação de biomarcadores. O elevado conteúdo de água, a alta biocompatibilidade, o custo-benefício vantajoso, a flexibilidade tecnológica e o potencial de miniaturização e automação tornam os SAB particularmente adequados para esta função. Assim, têm sido aplicados em diversos domínios da bioanálise, desde proteómica até testes laboratoriais e *point-of-care*, com o objetivo de melhorar a precisão e a sensibilidade dos resultados [23,24]. Este artigo oferece uma visão global sobre o desenvolvimento e aplicação dos SAB, com foco nos avanços proporcionados pela utilização de líquidos iónicos na análise de biomarcadores clínicos.

2. Sistemas aquosos bifásicos em aplicações bioanalíticas

Os SAB formam-se quando duas soluções aquosas incompatíveis, normalmente compostas por dois polímeros ou por um polímero e um sal, são misturadas dentro de uma determinada gama de concentração, temperatura e pH, resultando na formação de duas fases ricas em água [25]. O fenómeno foi observado inicialmente por Beijerinck no final do século XIX e, mais tarde, consolidado por Albertsson como uma técnica eficiente para separação de biomoléculas [26,27].

Os SAB são descritos por diagramas de fases que fornecem informações sobre a composição e propriedades das fases em equilíbrio termodinâmico, essenciais para aplicações bioanalíticas, tal como demonstrado na Figura 2 [25]. Na Figura 2A, é apresentado um esquema geral de um diagrama de fases correspondente a um SAB, num sistema ortogonal onde a concentração de água não é apresentada. A quantidade de água será a necessária para perfazer os 100% de composição. A curva de solubilidades, que delimita a região monofásica da bifásica, e as linhas de equilíbrio, que mostram a concentração dos solutos nas duas fases, são fundamentais para otimizar a extração de biomarcadores. As misturas de uma mesma linha de equilíbrio têm fases com composições e propriedades termodinâmicas idênticas, mas diferem nas razões volumétricas ou mássicas, gerando diferentes fatores de concentração (FC) que podem ser adaptados às necessidades da técnica analítica (Figura 2B). Estes

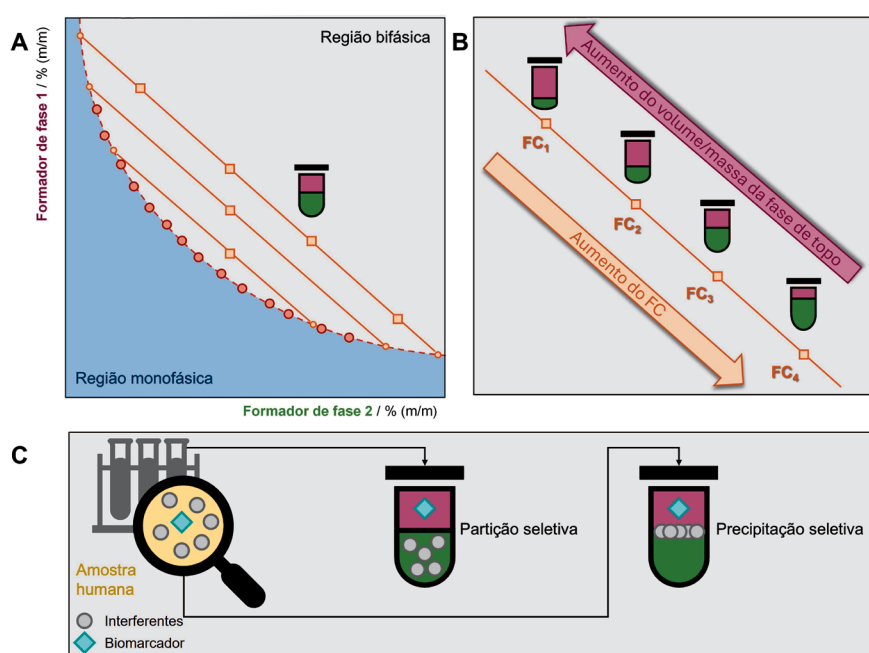


Figura 2 - Aspectos relevantes no desenvolvimento de estratégias de pré-tratamento de amostras humanas com recurso a SAB: (A) Diagrama de fases de um SAB, em representação ortogonal, mostrando a curva de solubilidade (linha vermelha tracejada) e as linhas de equilíbrio (linhas laranja) associadas a um determinado ponto de mistura (quadrado laranja); (B) Plataforma de concentração através da manipulação do FC ajustando a composição inicial da mistura ao longo de uma linha de equilíbrio; (C) Adaptação do conceito de SAB ao pré-tratamento de amostras humanas.

diagramas auxiliam no ajuste das condições ideais para a formação dos SAB e modulação da partição seletiva de componentes entre as fases (Figura 2C).

Os SAB compostos por polímeros, como a combinação de polietileno glicol (PEG) e dextrano (DEX), têm sido amplamente utilizados no pré-tratamento de amostras humanas, sendo aplicados, por exemplo, na extração de vesículas extracelulares para diagnóstico e monitorização de doenças da próstata, e no confinamento de anticorpos em imunoenaios [28-32]. Além de reduzirem o volume de amostra e o tempo dos procedimentos, melhoram os limites de deteção e ajudam a evitar falsos positivos e negativos. A substituição de um polímero por um sal de alta densidade de carga, como sulfato, fosfato ou citrato, acelera a formação de SAB, diminui a viscosidade e aumenta a diferença de polaridade entre as fases [25]. Neste tipo de sistemas, o biomarcador e as moléculas interferentes tendem a interagir com o polímero, enquanto são simultaneamente sujeitas ao efeito de *salting-out* induzido pelo componente salino [33]. Esta sinergia é útil no pré-tratamento de fluidos humanos, como a depleção de proteínas abundantes ou a extração seletiva de biomarcadores (ver Figura 2C), com destaque para a deteção de biomarcadores do cancro do pulmão e indicadores nutricionais [34-36]. Adicionalmente, os SAB podem ser aplicados na pré-concentração de amostras para ensaios imunocromatográficos de fluxo lateral, aumentando significativamente a sensibilidade em diagnósticos *point-of-care* [37,38].

Embora os SAB convencionais apresentem resultados promissores no pré-tratamento de amostras humanas, há ainda limitações em termos de remoção

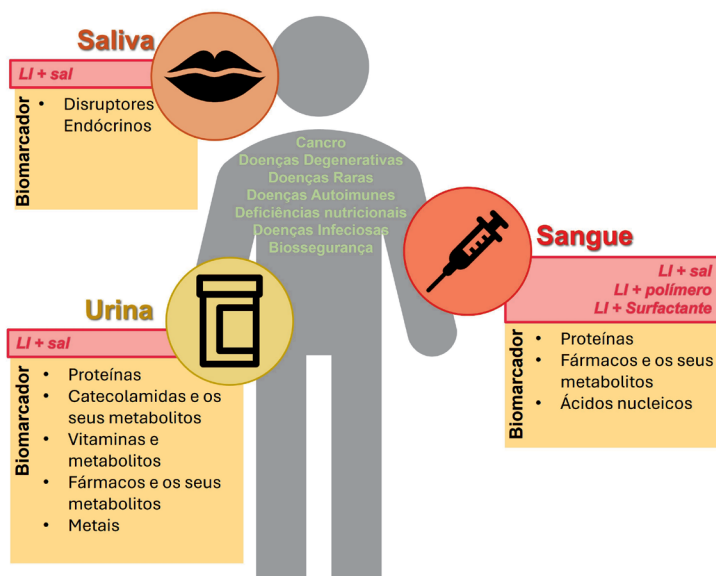
de interferentes e extração completa do biomarcador-alvo, especialmente em contextos clínicos que exigem elevada seletividade [39]. Para superar essas limitações, têm sido adotadas estratégias como o uso de componentes de fase alternativos e a incorporação de adjuvantes, incluindo líquidos iónicos, com o objetivo de expandir a gama de polaridades dos SAB e, consequentemente, melhorar a seletividade [40-44].

3. Líquidos iónicos como componentes de sistemas aquosos bifásicos no pré-tratamento de amostras humanas

Os líquidos iónicos (LIs) são sais orgânicos, compostos por combinações quase ilimitadas de catiões orgânicos e aniões, que podem ser tanto orgânicos quanto inorgânicos. A assimetria estrutural e cargas deslocalizadas destes compostos impede a formação de uma rede cristalina bem definida, permitindo que tenham pontos de fusão muito inferiores aos dos sais inorgânicos. Ao contrário de muitas substâncias iónicas, como o cloreto de sódio, que funde a cerca de 800°C, uma grande fração de LIs apresenta-se no estado líquido a temperaturas próximas da ambiente [45].

A maior diversidade de polaridades das fases e a versatilidade química conferida pelos LIs fazem da sua integração em SAB uma abordagem inovadora que permite superar as limitações dos sistemas poliméricos convencionais [46]. Esta estratégia combina as vantagens dos SAB, como elevado conteúdo de água e biocompatibilidade, com as possibilidades estruturais dos LIs, permitindo o desenvolvimento de sistemas específicos, seletivos e eficientes, sem depender de protocolos complexos, melhorando a seletividade na extração de biomarcadores e remoção

Figura 3 - Tipos de amostras humanas, biomarcadores, doenças e SAB-LI descritos na literatura no contexto da bioanálise.



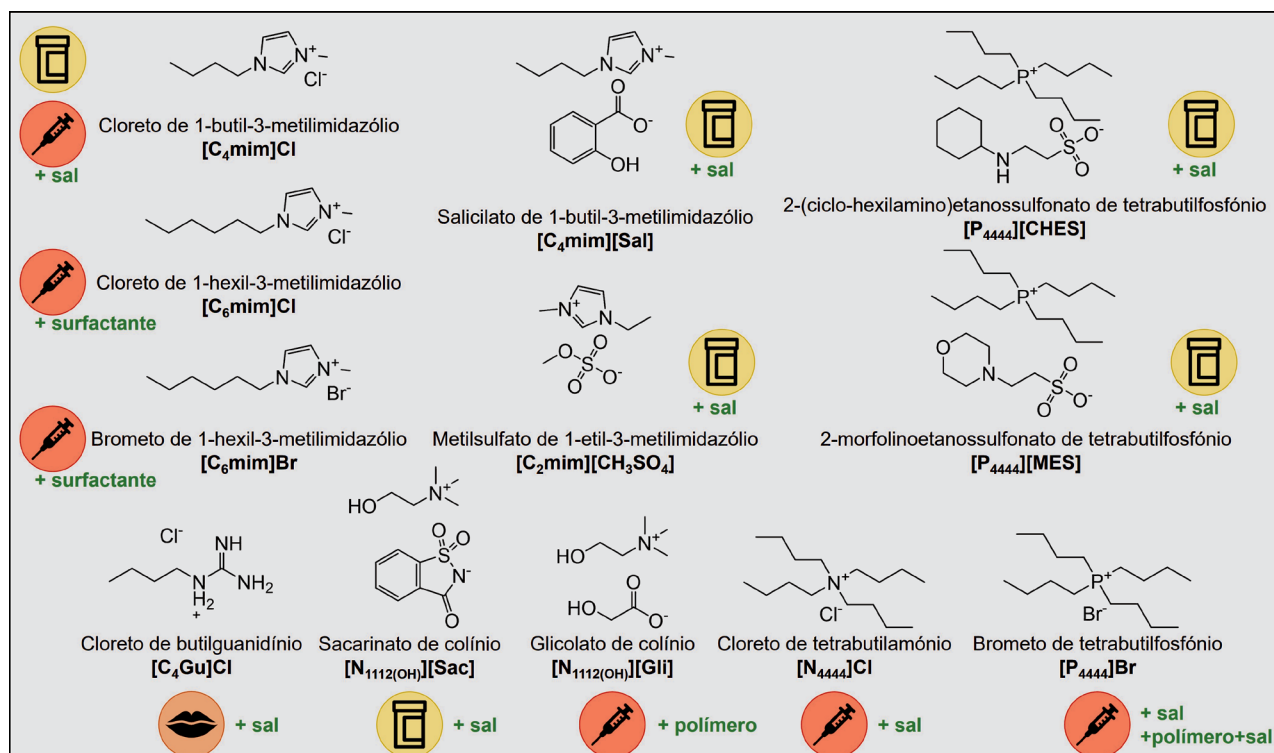
de interferentes, e adequando-se aos requisitos das análises clínicas [23,47].

A bibliografia, conforme resumido na Figura 3, descreve diversos exemplos da aplicação dos SAB-LI no pré-tratamento de amostras humanas, permitindo a extração e análise de biomarcadores relacionados com o diagnóstico, prognóstico, monitorização de terapias e avaliação da biossegurança. Os tipos de LIs utilizados estão sumariados na Figura 4, evidenciando tanto a sua diversidade estrutural como a versatilidade na formação e aplicação dos SAB-LI.

3.1. Pré-tratamento de amostras de urina

A detecção de biomarcadores na urina oferece uma abordagem não invasiva e eficaz para diagnóstico, monitorização e avaliação de terapias, refletindo o estado metabólico do organismo [48]. O pré-tratamento da urina envolve filtração, centrifugação e técnicas de extração, como a extração em fase sólida, para isolar os analitos de interesse, melhorando a sensibilidade das análises seguintes [49-51]. Na literatura, os SAB-LI surgem como uma alternativa eficiente e sustentável, permitindo a extração e concentração de biomarcadores como proteínas, catecolaminas, vitaminas, fármacos e metais, enquanto separam eficazmente os interferentes, facilitando a detecção de diversas condições médicas. A Figura 5 apresenta um resumo dos trabalhos abordados nesta secção, destacando as diversas aplicações dos SAB-LI no pré-tratamento de amostras de urina.

Figura 4 - Estruturas químicas, denominações e abreviaturas dos LIs, juntamente com o tipo de amostra e o par formador de SAB, aplicados no contexto da bioanálise.



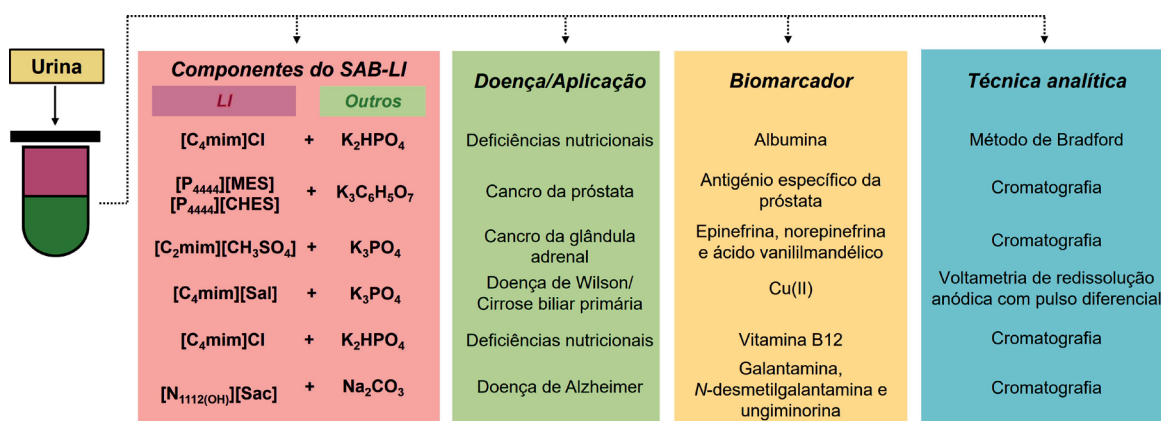


Figura 5 - Aplicação de SAB-LI no pré-tratamento de amostras de urina no contexto da bioanálise.

O primeiro exemplo da utilização de SAB-LI para a extração e concentração de biomarcadores a partir de amostras biológicas envolveu uma combinação padrão de LI e sal, nomeadamente o $[C_4mim]Cl$ e o hidrogenofosfato de dipotássio (K_2HPO_4) [52]. A extração de albumina, um biomarcador importante para avaliar o estado nutricional e as funções renal e hepática de pacientes, foi avaliada em urina artificial. As proteínas foram concentradas na fase rica em $[C_4mim]Cl$, com um fator de concentração (FC) de cinco, enquanto os metais e outros contaminantes foram removidos pela fase rica em sal. Com a adição de sal à fase separada rica em $[C_4mim]Cl$, o FC aumentou para 20. Embora tenham alcançado eficiências de extração de 100%, os FC obtidos foram limitados [52]. Um avanço significativo neste sentido foi descrito posteriormente pela possibilidade de manipular o FC, ajustando a composição inicial da mistura ao longo de uma linha de equilíbrio no diagrama de fases de SAB-LI [53]. A redução do volume da fase rica em LI aumentou proporcionalmente o FC do analito. A composição bifásica foi escolhida para garantir a extração completa sem saturar a fase rica em LI, utilizando uma linha de equilíbrio ideal para maximizar o FC, alcançando um valor de 100 [53]. Esta estratégia foi aplicada com sucesso ao desenvolvimento de plataformas de pré-concentração dedicadas ao diagnóstico do câncer [54,55]. A detecção urinária do antígeno específico da próstata (PSA), viabilizada por esta técnica, revelou-se promissora no diagnóstico diferencial do câncer da próstata. Foram utilizados LIS com capacidade para manter o pH, com a seleção de aniões derivados de tampões de Good, combinados com o citrato de tripotássio ($K_3C_6H_5O_7$) para promover o efeito de *salting-out* e obter linhas de equilíbrio ideais, resultando numa extração completa do PSA urinário na fase rica em LI. A seleção de SAB-LI com $[P_{4444}][MES]$ e $[P_{4444}][CHES]$ permitiu alcançar FC adequados (de até 250) para uma detecção eficiente do PSA, sem perdas ou saturação das fases, eliminando a necessidade de imunoenaios [54]. Esta estratégia

mostrou-se ainda viável para o diagnóstico de câncer da glândula adrenal, utilizando o sistema formado por $[C_2mim][CH_3SO_4]$ e fosfato de tripotássio (K_3PO_4) para pré-concentrar catecolaminas como epinefrina e norepinefrina, bem como o ácido vanililmandélico, permitindo a análise por cromatografia líquida acoplada a espectrometria de massa [55].

A flexibilidade dos SAB-LI destaca-se na aplicação em diversas patologias, como na Doença de Alzheimer, onde foram utilizados para extrair inibidores da acetilcolinesterase em amostras de urina [56]. O SAB-LI composto por $[N_{1112}(OH)][Sac]$, um LI de baixa toxicidade, e carbonato de sódio (Na_2CO_3) permitiu a recuperação eficiente de fármacos como galantamina e N-desmetilgalantamina, facilitando a quantificação precisa através de cromatografia líquida com detecção UV, contribuindo para tratamentos mais eficazes [56].

O uso de SAB-LI permite o controlo rigoroso do pH, o qual é crucial no pré-tratamento de amostras de urina, pois afeta a afinidade, solubilidade e estabilidade dos componentes da matriz. Sendo especialmente determinante para a seletividade e adequabilidade do sistema em relação aos analitos de interesse, um exemplo notável de extração de biomarcadores sensíveis ao pH é o caso dos iões metálicos [57]. Esta abordagem, que se baseou na formação de complexos estáveis entre o anião do LI $[C_4mim][Sal]$ e o cobre, prevenindo a sua hidrólise, foi eficaz na análise de cobre em matrizes complexas e assume especial relevância na monitorização de doenças raras e autoimunes, como a Doença de Wilson [57].

Outra das principais vantagens dos SAB-LI é a simplificação do processo analítico, integrando num único passo a remoção de interferentes e a extração/concentração dos analitos. Contudo, a extração de vitamina B12 a partir de urina humana exigiu uma etapa prévia de centrifugação antes da aplicação de um SAB-LI constituído por $[C_4mim]Cl$ e K_2HPO_4 [58]. Apesar da complexidade adicional, a estratégia

permitiu extrair 97% da vitamina e viabilizou a sua detecção por cromatografia líquida com detecção UV/Vis, demonstrando potencial para diagnóstico precoce de deficiências nutricionais [58].

Com base na informação analisada, a utilização de SAB-LI tem um impacto positivo no pré-tratamento de amostras de urina, proporcionando uma abordagem eficiente e seletiva para a extração e concentração de biomarcadores. Por um lado, ao explorar a manipulação da composição do sistema ao longo de uma linha de equilíbrio, alcançando FC elevados, é possível detetar biomarcadores tumorais (ver Figura 2B). Por outro lado, os SAB-LI têm demonstrado eficácia na monitorização do tratamento de doenças, ao permitir a extração de fármacos e simplificar o seu processo de quantificação. No entanto, apesar dos avanços, alguns desafios ainda persistem, incluindo a necessidade de etapas adicionais, como a centrifugação, para a extração e análise de determinados biomarcadores, o que pode aumentar a complexidade do pré-tratamento. De forma geral, a capacidade dos SAB-LI de integrar diversas etapas de processamento de amostras de urina – como extração, purificação e concentração – num único passo destaca-se como uma das suas principais vantagens, tornando o processo analítico mais eficiente e sustentável.

3.2. Pré-tratamento de amostras de sangue

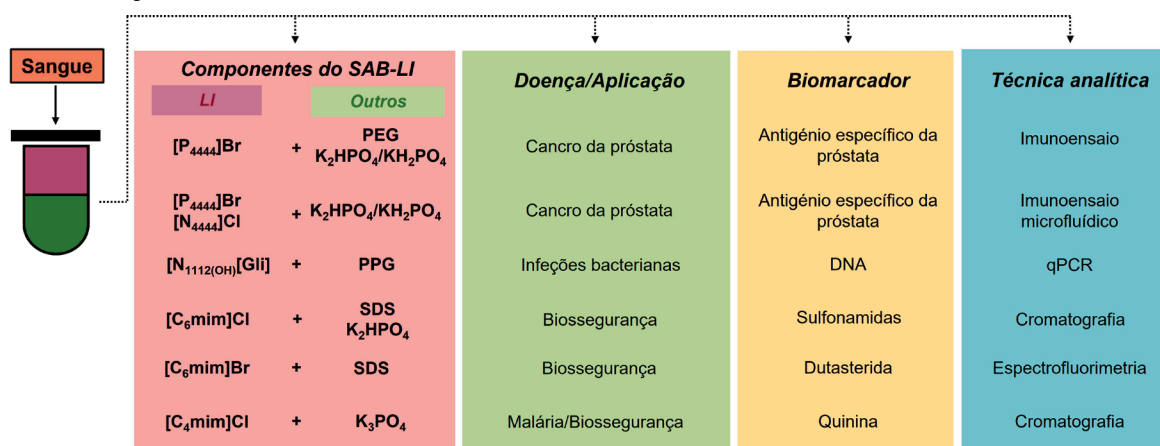
As amostras de sangue, particularmente o soro e o plasma, são fundamentais na prática clínica para o diagnóstico e monitorização de diversas patologias [59]. O plasma corresponde à porção líquida do sangue obtida após a centrifugação de uma amostra com anticoagulantes. O soro é obtido após a coagulação do sangue e subsequente centrifugação, resultando numa solução contendo eletrólitos, proteínas e outras substâncias dissolvidas [60]. O pré-tratamento destas amostras visa remover componentes interferentes,

como proteínas abundantes e lípidos, que podem comprometer a detecção de biomarcadores-alvo [61]. Os SAB-LI têm sido recentemente reconhecidos na literatura como uma estratégia eficaz para a separação seletiva de biomarcadores, como proteínas, ácidos nucleicos e fármacos, sendo compatíveis com técnicas analíticas como cromatografia líquida acoplada a um método de detecção e imunoenaios. A versatilidade dos SAB-LI, potenciada pela combinação de LIs com sais, surfactantes ou polímeros, tem impulsionado a sua aplicação na detecção de várias doenças, conforme ilustrado na Figura 6.

Os SAB-LI apresentam-se como um método eficiente para a depleção das proteínas maioritárias do sangue, nomeadamente a imunoglobulina G e a albumina, permitindo, simultaneamente, a extração de biomarcadores tumorais. Para atingir este objetivo, os SAB-LI podem ser formulados de duas formas, com o LI a desempenhar o papel de adjuvante ou como formador de fase principal [62]. Um exemplo promissor envolve o uso de PEG de 1000 g/mol, K_2HPO_4/KH_2PO_4 e $[P_{4444}]Br$ como adjuvante, permitindo uma depleção superior a 95% de albumina e 99% de imunoglobulina G na interface, além de uma extração superior a 97% do PSA para a fase rica em PEG/LI (Figura 2C) [62]. A utilização de LIs como adjuvantes melhorou significativamente a eficácia do pré-tratamento e da extração do PSA, em comparação com sistemas compostos exclusivamente por PEG e sal [62]. Esta abordagem mostrou ser particularmente útil em contextos com recursos limitados, ao proporcionar uma alternativa eficiente e acessível para a detecção do cancro da próstata no *point-of-care*. A aplicabilidade dos SAB-LI foi demonstrada na quantificação do PSA em microescala, por meio de um imunoenensaio miniaturizado em dispositivos microfluídicos, obtendo um limite de detecção de 5 ng/mL, valor que se encontra dentro da faixa clinicamente relevante para diagnóstico do cancro da próstata [63].

Visando aprimorar o diagnóstico de infeções

Figura 6 – Aplicação de SAB-LI no pré-tratamento de amostras de sangue no contexto da bioanálise.



bacterianas, foi desenvolvido um SAB-LI inovador, combinando $[N_{1112(OH)}][Gli]$, com polipropileno glicol (PPG) de 400 g/mol e ampliando a gama de SAB-LI estudados, que, até ao momento, se baseava em combinações de LI com sais ou no uso do LI como adjuvante [64]. Esta formulação permitiu, a pH 5, a precipitação seletiva da albumina na interface e a extração eficiente de ADN bacteriano na fase rica em LI. O ADN obtido apresentou elevada pureza (>98%) e estabilidade (de pelo menos seis meses), possibilitando a sua quantificação por PCR em tempo real [64].

Finalmente, a utilização de SAB-LI também mostrou ser promissora para a monitorização de biomarcadores de biossegurança, permitindo a deteção de compostos farmacológicos e outras substâncias no organismo humano. Sistemas contendo $[C_6mim]Cl$ ou $[C_6mim]Br$ combinados com K_2HPO_4 e SDS permitiram extrair sulfonamidas e dutasterida com eficiências superiores a 90%, em apenas três minutos [65,66]. A extração com SAB-LI aumentou significativamente a intensidade de fluorescência da dutasterida, permitindo a sua deteção a níveis clinicamente relevantes [66]. De igual modo, o uso de um SAB-LI constituído por $[C_4mim]Cl/K_3PO_4$ para a extração de quinina em plasma permitiu um rendimento elevado (89-106%) e a sua quantificação por cromatografia líquida com deteção por fluorescência, sendo útil no controlo terapêutico da malária [67]. Estas abordagens destacam-se pela rapidez, sensibilidade e menor impacto ambiental face a SAB mais comuns, como por exemplo, SAB constituídos por acetonitrilo e K_2HPO_4 [68].

De acordo com os trabalhos discutidos, os SAB-LI demonstram grande potencial no pré-tratamento de amostras de sangue, destacando-se pela sua capacidade de depleção eficaz de proteínas maioritárias e extração de biomarcadores com elevada pureza. A versatilidade destes sistemas, ao combinar LIs com diferentes sais, polímeros e surfactantes, aliada à sua seletividade, permite a adaptação a várias aplicações bioanalíticas, incluindo a deteção precoce de cancro e de infeções bacterianas. Quando corretamente formulados, os SAB-LI não só possibilitam a extração eficiente de biomarcadores, como também oferecem uma alternativa acessível

para ambientes com recursos limitados. Contudo, os principais desafios permanecem na otimização das condições de pH e na necessidade de garantir a estabilidade das amostras e dos analitos de interesse em diferentes contextos clínicos.

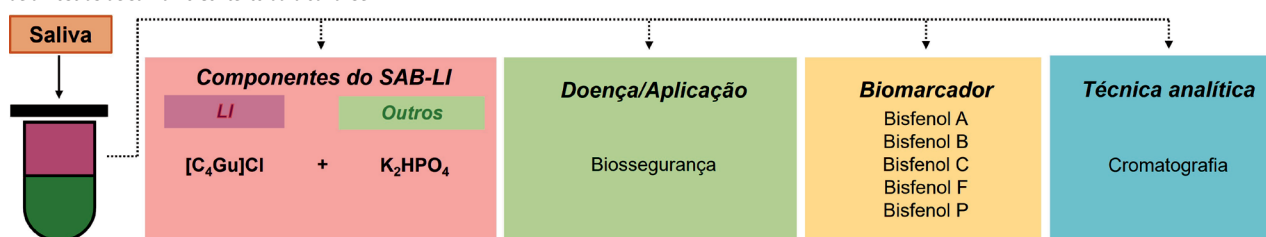
3.3. Pré-tratamento de amostras de saliva

A saliva, por ser um fluido rico em biomoléculas e de colheita não invasiva, oferece a vantagem de ser mais acessível do que a análise de outros fluidos biológicos, como o sangue [69]. Embora a análise direta da saliva seja, idealmente, a abordagem preferencial, o seu pré-tratamento é frequentemente indispensável para garantir a preparação adequada da amostra e obter resultados fidedignos [70,71]. A literatura relata apenas uma aplicação de SAB-LI na análise de saliva, integrando num único procedimento a limpeza, microextração e pré-concentração da amostra [72].

A Figura 7 apresenta um resumo da abordagem proposta para o pré-tratamento de amostras de saliva com SAB-LI, com o objetivo de melhorar a análise de disruptores endócrinos. Utilizando o LI $[C_4Gu]Cl$ com o sal K_2HPO_4 para a formação do SAB-LI, foi possível remover aproximadamente 70% das proteínas salivares através da precipitação na interface do sistema (Figura 2C). A microextração e pré-concentração dos biomarcadores, neste caso vários bisfenóis, foram realizadas de forma simultânea, resultando em FC de até três vezes. A análise foi realizada com sucesso utilizando cromatografia líquida com deteção de fluorescência, apresentando limites de deteção de até 0,40 ng/mL e recuperações médias de 106%. Este trabalho resultou no desenvolvimento de um método analítico que, além de ser altamente eficiente, é também mais sustentável, estando alinhado com os princípios da Química Analítica Verde e apresentando um índice de sustentabilidade ambiental (AGREEprep) satisfatório, de 0,63 [72,73].

Embora ainda pouco explorados em contextos de análise de saliva, os SAB-LI oferecem uma abordagem eficiente, sustentável e acessível para a determinação de biomarcadores salivares, com grande potencial para aplicações clínicas no diagnóstico e monitorização de riscos em saúde.

Figura 7 - Aplicação de SAB-LI no pré-tratamento de amostras de saliva no contexto da bioanálise.



4. Conclusões e Perspetivas Futuras

O presente artigo de revisão apresenta uma análise abrangente sobre o potencial dos SAB-LI em bioanálise, com enfoque nas suas aplicações clínicas. Os SAB-LI constituem uma inovação determinante no pré-tratamento de amostras humanas, aliando seletividade, sustentabilidade e eficiência analítica. A sua implementação revela-se decisiva para contornar as limitações impostas pelos métodos tradicionais, como a extração em fase sólida, a extração líquido-líquido clássica e a precipitação de proteínas, impulsionando a deteção fiável de biomarcadores em ambientes laboratoriais e *point-of-care*.

A Figura 8 apresenta uma análise SWOT (forças, fraquezas, oportunidades e ameaças) dos SAB-LI comparados com as abordagens convencionais de pré-tratamento de amostras humanas. De forma geral, os SAB-LI destacam-se pela alta seletividade, sustentabilidade e compatibilidade com biomarcadores, mas enfrentam desafios como custos associados ao uso de LIs da família dos imidazólios. As oportunidades incluem aplicações em novas plataformas bioanalíticas, miniaturização e automação, enquanto as ameaças advêm da forte concorrência com métodos já estabelecidos e desafios regulatórios.

Para consolidar os SAB-LI como estratégias eficazes de pré-tratamento de amostras humanas na área clínica, é crucial considerar diversos aspetos técnicos e de desempenho que garantam a eficiência da extração e a fiabilidade dos resultados analíticos:

- **Seleção do LI:** O LI influencia diretamente a formação do SAB, bem como a seletividade e a eficiência de extração dos biomarcadores e remoção dos principais interferentes da matriz biológica. Devem ser cuidadosamente avaliados parâmetros como polaridade, hidrofobicidade e interações específicas do LI com os analitos-alvo.
- **Escolha do par formador de SAB:** O par formador de SAB-LI é essencial para o pré-tratamento e a sua escolha depende do tipo de amostra. Sais com elevado poder de *salting-out* são eficazes na pré-concentração de biomarcadores urinários e salivares e na precipitação de interferentes em sangue e saliva. Para amostras de sangue, que exigem maior seletividade, o uso de polímeros e surfactantes pode ser uma opção viável, oferecendo um controlo mais preciso das interações sem a sobreposição do efeito de *salting-out*.
- **Otimização das condições experimentais:** O pH e a composição do SAB podem afetar a partição dos biomarcadores, sendo necessário ajustá-los para maximizar a seletividade da extração. A razão volumétrica ou mássica das fases influencia a eficiência de pré-concentração e deve ser ajustada

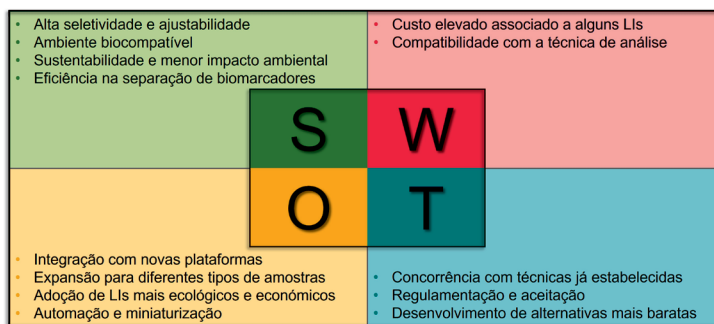


Figura 8 - Análise SWOT dos SAB-LI em relação às técnicas tradicionais de pré-tratamento de amostras humanas.

conforme os requisitos analíticos.

- **Mecanismos de extração e pré-concentração:** O pré-tratamento pode ser impulsionado por interações eletrostáticas, ligações por pontes de hidrogénio ou efeitos hidrofóbicos, dependendo da natureza dos biomarcadores e da sua afinidade para os componentes do SAB-LI. A pré-concentração pode ser modulada através da manipulação da composição do SAB-LI, melhorando a sensibilidade da análise.
- **Integração com técnicas analíticas:** Os SAB-LI podem ser combinados com métodos cromatográficos, espectrométricos e imunoensaios, permitindo a deteção precisa dos biomarcadores-alvo. A compatibilidade dos SAB-LI com a técnica analítica deve ser cuidadosamente avaliada para evitar interferências nos sinais analíticos e possíveis danos nos equipamentos.
- **Flexibilidade tecnológica:** Os SAB-LI têm grande potencial para o desenvolvimento de plataformas universais de pré-tratamento de amostras clínicas, permitindo a extração seletiva de diversos biomarcadores de fluidos biológicos como sangue, urina e saliva, e podendo ser aplicados a outros tipos de matrizes biológicas.
- **Sustentabilidade:** A aplicação dos SAB-LI melhora a sensibilidade e especificidade das análises, enquanto reduz ou elimina o uso de solventes orgânicos, promovendo práticas laboratoriais sustentáveis e alinhadas aos princípios “verdes” de preparação de amostras. Sugere-se a utilização de métricas como o AGREEprep para avaliar o impacto ambiental [73,74].
- **Validação com amostras de pacientes:** É fundamental avaliar a transferibilidade dos SAB-LI para amostras de pacientes, a fim de garantir a sua eficácia e reprodutibilidade em condições reais. Os principais desafios incluem a complexidade e variabilidade das matrizes biológicas, que podem ser influenciadas por condições fisiológicas específicas ou comorbilidades.

Posto isto, as perspetivas futuras para esta

tecnologia são extremamente promissoras, abrindo a expansão das suas aplicações clínicas e a otimização e padronização de protocolos. Além disso, a miniaturização, automação e a possibilidade de implementação no *point-of-care*, com especial relevância em contextos de recursos limitados, são aspetos de grande potencial. Com o avanço da investigação nesta área, espera-se que os SAB-LI se tornem uma ferramenta importante na medicina moderna, contribuindo para avanços no rastreio e diagnóstico clínico, bem como para cuidados de saúde mais eficazes e acessíveis a uma população global.

Agradecimentos

Este trabalho foi desenvolvido no âmbito do projeto CICECO–Aveiro Institute of Materials, UIDB/50011/2020 (DOI: 10.54499/UIDB/50011/2020), UIDP/50011/2020 (DOI: 10.54499/UIDP/50011/2020) & LA/P/0006/2020 (DOI: 10.54499/LA/P/0006/2020), financiado por fundos nacionais através da FCT/MCTES (PIDDAC). Este trabalho foi financiado por fundos nacionais (OE), através da FCT/MCTES, no âmbito do projeto ILSurvive, PTDC/EMD-TLM/3253/2020 (DOI: 10.54499/PTDC/EMD-TLM/3253/2020). Maria S. M. Mendes agradece à FCT pela bolsa de doutoramento 2022.11229.BD. Francisca A. e Silva agradece à FCT pelo contrato de investigador CEECIND/03076/2018/CP1559/CT0024 (DOI: 10.54499/CEECIND/03076/2018/CP1559/CT0024) ao abrigo do Estímulo ao Emprego Científico.

Referências

- [1] J. K. Aronson, R. E. Ferner, *Curr. Protoc. Pharmacol.* **2017**, 76, 1–17. DOI: 10.1002/cpph.19.
- [2] J. Gao, L.-A. Garulacan, S. M. Storm, G. J. Opiteck, Y. Dubaque, S. A. Hefta, D. M. Dambach, A. R. Dongre, *Methods* **2005**, 35, 291–302. DOI: 10.1016/j.ymeth.2004.08.020.
- [3] P. M. Ridker, *Circulation* **2003**, 108, e81–e85. DOI: 10.1161/01.CIR.0000093381.57779.67.
- [4] K. Thygesen, J. S. Alpert, A. S. Jaffe, M. L. Simoons, B. R. Chaitman, H. D. White, K. Thygesen, J. S. Alpert, H. D. White, A. S. Jaffe, H. A. Katus, F. S. Apple, B. Lindahl, D. A. Morrow, B. R. Chaitman, P. M. Clemmensen, P. Johanson, H. Hod, R. Underwood, J. J. Bax, R. O. Bonow, F. Pinto, R. J. Gibbons, K. A. Fox, D. Atar, L. K. Newby, M. Galvani, C. W. Hamm, B. F. Uretsky, P. G. Steg, W. Wijns, J.-P. Bassand, P. Menasché, J. Ravkilde, E. M. Ohman, E. M. Antman, L. C. Wallentin, P. W. Armstrong, M. L. Simoons, J. L. Januzzi, M. S. Nieminen, M. Gheorghiade, G. Filippatos, R. V. Luepker, S. P. Fortmann, W. D. Rosamond, D. Levy, D. Wood, S. C. Smith, D. Hu, J.-L. Lopez-Sendon, R. M. Robertson, D. Weaver, M. Tendera, A. A. Bove, A. N. Parkhomenko, E. J. Vasilieva, S. Mendis, J. J. Bax, H. Baumgartner, C. Ceconi, V. Dean, C. Deaton, R. Fagard, C. Funck-Brentano, D. Hasdai, A. Hoes, P. Kirchhof, J. Knuuti, P. Kolh, T. McDonagh, C. Moulin, B. A. Popescu, Z. Reiner, U. Sechtem, P. A. Sirnes, M. Tendera, A. Torbicki, A. Vahanian, V. Wendt, J. Morais, C. Aguiar, W. Almahmeed, D. O. Arnar, F. Barili, K. D. Bloch, A. F. Bolger, H. E. Botker, B. Bozkurt, R. Bugjardini, C. Cannon, J. de Lemos, F. R. Eberli, E. Escobar, M. Hlatky, S. James, K. B. Kern, D. J. Moliterno, C. Mueller, A. N. Neskovic, B. M. Pieske, S. P. Schulman, R. F. Storey, K. A. Taubert, P. Vranckx, D. R. Wagner, *Eur. Heart J.* **2012**, 33, 2551–2567. DOI: 10.1093/eurheartj/ehs184.
- [5] A. S. Levey, J. Coresh, *Lancet* **2012**, 379, 165–180. DOI: 10.1016/S0140-6736(11)60178-5.
- [6] D. Z. Chang, K. S. Panageas, I. Osman, D. Polsky, K. Busam, P. B. Chapman, *J. Transl. Med.* **2004**, 2, 46. DOI: 10.1186/1479-5876-2-46.
- [7] R. Mayeux, *NeuroRX* **2004**, 1, 182–188. DOI: 10.1602/neurorx.1.2.182.
- [8] M. J. Pletcher, M. Pignone, *Circulation* **2011**, 123, 1116–1124. DOI: 10.1161/CIRCULATIONAHA.110.943860.
- [9] F.-S. Ou, S. Michiels, Y. Shyr, A. A. Adjei, A. L. Oberg, *J. Thorac. Oncol.* **2021**, 16, 537–545. DOI: 10.1016/j.jtho.2021.01.1616.
- [10] A. Bodaghi, N. Fattahi, A. Ramazani, *Heliyon* **2023**, 9, e13323. DOI: 10.1016/j.heliyon.2023.e13323.
- [11] P. L. Kole, G. Venkatesh, J. Kotecha, R. Sheshala, *Biomed. Chromatogr.* **2011**, 25, 199–217. DOI: 10.1002/bmc.1560.
- [12] K. Chandramouli, P.-Y. Qian, *Hum. Genomics Proteomics* **2009**, 239204. DOI: 10.4061/2009/239204.
- [13] C. E. Thomas, W. Sexton, K. Benson, R. Sutphen, J. Koomen, *Cancer Epidemiol. Biomarkers Prev.* **2010**, 19, 953–959. DOI: 10.1158/1055-9965.EPI-10-0069.
- [14] S. Rischke, L. Hahnefeld, B. Burla, F. Behrens, R. Gurke, T. J. Garrett, *J. Mass Spectrom. Adv. Clin. Lab* **2023**, 28, 47–55. DOI: 10.1016/j.jmsacl.2023.02.003.
- [15] Z. Niu, W. Zhang, C. Yu, J. Zhang, Y. Wen, *TrAC Trends Anal. Chem.* **2018**, 102, 123–146. DOI: 10.1016/j.trac.2018.02.005.
- [16] L. Huasheng, L. Gongke, *J. Chromatogr. A* **2024**, 1734, 465293. DOI: 10.1016/j.chroma.2024.465293.
- [17] P. Ray, Y. Le Manach, B. Riou, T. T. Houle, D. S. Warner, *Anesthesiology* **2010**, 112, 1023–1040. DOI: 10.1097/ALN.0b013e3181d47604.
- [18] J. Moreda-Piñeiro, A. Moreda-Piñeiro, *TrAC Trends Anal. Chem.* **2015**, 71, 265–274. DOI: 10.1016/j.trac.2015.02.025.
- [19] J. L. Nickerson, A. A. Doucette, *J. Proteome Res.* **2020**, 19, 2035–2042. DOI: 10.1021/acs.jproteome.9b00867.
- [20] R. R. Burgess, *Methods Enzymol.* **2009**, 463, 331–342. DOI: 10.1016/S0076-6879(09)63020-2.
- [21] X. Fang, W.-W. Zhang, *J. Proteomics* **2008**, 71, 284–303. DOI: 10.1016/j.jprot.2008.06.011.
- [22] S. F. Hammad, I. A. Abdallah, A. Bedair, F. R. Mansour, *J. Sep. Sci.* **2022**, 45, 185–209. DOI: 10.1002/jssc.202100452.
- [23] M. S. M. Mendes, M. E. Rosa, F. Ramalho, M. G. Freire, F. A. e Silva, *Sep. Purif. Technol.* **2023**, 317, 123875. DOI: 10.1016/j.seppur.2023.123875.
- [24] A. G. Teixeira, R. Agarwal, K. R. Ko, J. Grant-Burt, B. M. Leung, J. P. Frampton, *Adv. Healthcare Mater.* **2018**, 7, 1701036. DOI: 10.1002/adhm.201701036.
- [25] M. Iqbal, Y. Tao, S. Xie, Y. Zhu, D. Chen, X. Wang, L. Huang, D. Peng, A. Sattar, M. A. B. Shabbir, H. I. Hussain, S. Ahmed, Z. Yuan, *Biol. Proced. Online* **2016**, 18, 18. DOI: 10.1186/s12575-016-0048-8.
- [26] M. W. Beijerinck, *Zeitschrift für Chemie und Ind. der Kolloide* **1910**, 7, 16–20. DOI: 10.1007/BF01503954.
- [27] P.-Å. Albertsson, *Nature* **1958**, 182, 709–711. DOI: 10.1038/182709a0.
- [28] H. Shin, C. Han, J. M. Labuz, J. Kim, S. Cho, Y. S. Gho, S. Takayama, J. Park, *Sci. Rep.* **2015**, 5, 13103. DOI: 10.1038/srep13103.
- [29] H. Shin, Y. H. Park, Y. G. Kim, J. Y. Lee, J. Park, *PLoS One* **2018**, 13, e0194818. DOI: 10.1371/journal.pone.0194818.
- [30] B. H. Han, S. Kim, G. Seo, Y. Heo, S. Chung, J. Y. Kang, *Lab Chip* **2020**, 20, 3552–3559. DOI: 10.1039/d0lc00345j.
- [31] J. P. Frampton, J. B. White, A. B. Simon, M. Tsuei, S. Paczesny, S. Takayama, *Sci. Rep.* **2014**, 4, 4878. DOI: 10.1038/srep04878.
- [32] M. Kvas, A. G. Teixeira, B. Chiang, J. P. Frampton, *Analyst* **2020**, 145, 5458–5465. DOI: 10.1039/D0AN00699H.
- [33] A. Barani, M. Pirdashti, Z. Heidari, E.-N. Dragoi, *Fluid Phase Equilib.* **2018**, 459, 1–9. DOI: 10.1016/j.fluid.2017.11.037.
- [34] A. Mahn, M. E. Lienqueo, C. Quilodrán, A. Olivera-Nappa, *J. Sep. Sci.* **2012**, 35, 3184–3189. DOI: 10.1002/jssc.201200646.
- [35] M. S. M. Mendes, M. E. Rosa, J. A. P. Coutinho, M. G. Freire, F. A. e Silva, *Int. J. Biol. Macromol.* **2023**, 253, 127540. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2023.127540.
- [36] M. E. Rosa, M. S. M. Mendes, D. C. V. Belchior, J. A. P. Coutinho, F. A. e Silva, M. G. Freire, *Adv. Sample Prep.* **2024**, 10, 100116. DOI: 10.1016/j.sampre.2024.100116.
- [37] A. P. Luu, S. S. Rao, H. Y. Malik, R. B. Shi, A. A. Toubian, D. T. Kamei, *Anal. Biochem.* **2024**, 694, 115634. DOI: 10.1016/j.ab.2024.115634.

- [38] D. W. Bradbury, M. Azimi, A. J. Diaz, A. A. Pan, C. H. Falktoft, B. M. Wu, D. T. Kamei, *Anal. Chem.* **2019**, 91, 12046–12054. DOI: 10.1021/acs.analchem.9b03105.
- [39] J. F. B. Pereira, L. P. N. Rebelo, R. D. Rogers, J. A. P. Coutinho, M. G. Freire, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2013**, 15, 19580. DOI: 10.1039/c3cp53701c.
- [40] B. A. Shoushtari, G. Pazuki, J. R. Shahrouzi, S. Shahriari, N. Hadidi, *Fluid Phase Equilib.* **2020**, 505, 112360. DOI: 10.1016/j.fluid.2019.112360.
- [41] L. Das, S. P. Paik, K. Sen, *J. Chem. Eng. Data* **2021**, 66, 4629–4638. DOI: 10.1021/acs.jced.1c00632.
- [42] R. Sadeghi, B. Hamidi, N. Ebrahimi, *J. Phys. Chem. B* **2014**, 118, 10285–10296. DOI: 10.1021/jp505383r.
- [43] M. A. O. da Silva, M. A. Z. Arruda, *Talanta* **2009**, 77, 985–990. DOI: 10.1016/j.talanta.2008.07.055.
- [44] P. Xu, Y. Wang, J. Chen, X. Wei, W. Xu, R. Ni, J. Meng, Y. Zhou, *Talanta* **2018**, 189, 467–479. DOI: 10.1016/j.talanta.2018.07.035.
- [45] W. Silva, M. Zanatta, A. S. Ferreira, M. C. Corvo, E. J. Cabrita, *Int. J. Mol. Sci.* **2020**, 21, 7745. DOI: 10.3390/ijms21207745.
- [46] S. F. Carvalho, M. H. Custódio, A. B. Pereira, J. M. M. Araújo, *Int. J. Mol. Sci.* **2024**, 25, 5766. DOI: 10.3390/ijms25115766.
- [47] A. Basaiahgari, R. L. Gardas, *Curr. Opin. Green Sustain. Chem.* **2021**, 27, 100423. DOI: 10.1016/j.cogsc.2020.100423.
- [48] D. Fliser, J. Novak, V. Thongboonkerd, A. G. A. Argiles, V. Jankowski, M. A. Girolami, J. Jankowski, H. Mischak, *J. Am. Soc. Nephrol.* **2007**, 18, 1057–1071. DOI: 10.1681/ASN.2006090956.
- [49] L.-A. K. Djornang, C. Li, O. Mzava, A. P. Cheng, A. Chang, J. S. Lenz, M. Suthanthiran, J. R. Lee, D. M. Dadhania, I. De Vlaminck, *Sci. Rep.* **2024**, 14, 10872. DOI: 10.1038/s41598-024-54239-x.
- [50] N. Chungkanchana, P. Sithithaworn, C. Worasith, P. Wongphutorn, S. Ruantip, K. Y. Kopolrat, A. Jusakul, R. Thanan, K. Duenngai, J. Sithithaworn, A. Techasen, *J. Clin. Microbiol.* **2022**, 60, e01454–21. DOI: 10.1128/JCM.01454-21.
- [51] E. Eren, A. G. Sürü, N. Yilmaz, C. Öz, *New Trends Med. Sci.* **2022**, 3, 91–97. DOI: 10.56766/ntms.823790.
- [52] Z. Du, Y. Yu, J. Wang, *Chem. Eur. J.* **2007**, 13, 2130–2137. DOI: 10.1002/chem.200601234.
- [53] H. Passos, A. C. A. Sousa, M. R. Pastorinho, A. J. A. Nogueira, L. P. N. Rebelo, J. A. P. Coutinho, M. G. Freire, *Anal. Methods* **2012**, 4, 2664–2667. DOI: 10.1039/c2ay25536g.
- [54] M. M. Pereira, J. D. Calixto, A. C. A. Sousa, B. J. Pereira, Á. S. Lima, J. A. P. Coutinho, M. G. Freire, *Sci. Rep.* **2020**, 10, 14931. DOI: 10.1038/s41598-020-71925-8.
- [55] M. M. Pereira, L. L. R. Brito, R. de C. M. de Miranda, R. L. de Souza, C. M. F. Soares, J. A. P. Coutinho, M. G. Freire, Á. S. Lima, *J. Mol. Liq.* **2022**, 367, 120409. DOI: 10.1016/j.molliq.2022.120409.
- [56] M. G. Bogdanov, I. Svinyarov, *J. Chromatogr. A* **2018**, 1559, 62–68. DOI: 10.1016/j.chroma.2018.01.007.
- [57] T. Trtić-Petrović, A. Dimitrijević, N. Zdošek, J. Đorđević, A. Tot, M. Vraneš, S. Gadžurić, *Anal. Bioanal. Chem.* **2018**, 410, 155–166. DOI: 10.1007/s00216-017-0705-z.
- [58] P. Berton, R. P. Monasterio, R. G. Wuilloud, *Talanta* **2012**, 97, 521–526. DOI: 10.1016/j.talanta.2012.05.008.
- [59] N. Rifai, M. A. Gillette, S. A. Carr, *Nat. Biotechnol.* **2006**, 24, 971–983. DOI: 10.1038/nbt1235.
- [60] A. Vignoli, L. Tenori, C. Morsiani, P. Turano, M. Capri, C. Luchinat, *J. Proteome Res.* **2022**, 21, 1061–1072. DOI: 10.1021/acs.jproteome.1c00935.
- [61] P. Y. Lee, J. Osman, T. Y. Low, R. Jamal, *Bioanalysis* **2019**, 11, 1799–1812. DOI: 10.4155/bio-2019-0145.
- [62] M. E. Rosa, M. S. M. Mendes, E. Carmo, J. P. Conde, J. A. P. Coutinho, M. G. Freire, F. A. e Silva, *Sep. Purif. Technol.* **2023**, 322, 124248. DOI: 10.1016/j.seppur.2023.124248.
- [63] F. C. Flora, S. B. Relvas, F. A. e Silva, M. G. Freire, V. Chu, J. P. Conde, *Biosensors* **2023**, 13, 334. DOI: 10.3390/bios13030334.
- [64] A. M. Ferreira, M. V. Quental, M. Sharma, D. Mondal, A. Q. Pedro, J. A. P. Coutinho, M. G. Freire, *Sep. Purif. Technol.* **2023**, 316, 123801. DOI: 10.1016/j.seppur.2023.123801.
- [65] W. Yu, K. Li, Z. Liu, H. Zhang, X. Jin, *Microchem. J.* **2018**, 136, 263–269. DOI: 10.1016/j.microc.2017.03.053.
- [66] A. Gong, X. Zhu, *Fluid Ph. Equilib.* **2014**, 374, 70–78. DOI: 10.1016/j.fluid.2014.04.022.
- [67] J. Flieger, A. Czajkowska-Żelazko, *Food Chem.* **2015**, 166, 150–157. DOI: 10.1016/j.foodchem.2014.06.037.
- [68] W. Yu, Z. Liu, S. Gao, S. Cui, X. Yang, W. Qiu, H. Zhang, A. Yu, Y. Huan, *Anal. Methods* **2013**, 5, 5983–5989. DOI: 10.1039/C3AY40902C.
- [69] M. Song, H. Bai, P. Zhang, X. Zhou, B. Ying, *Int. J. Oral Sci.* **2023**, 15, 2. DOI: 10.1038/s41368-022-00209-w.
- [70] I. T. Gug, M. Tertis, O. Hosu, C. Cristea, *TrAC Trends Anal. Chem.* **2019**, 113, 301–316. DOI: 10.1016/j.trac.2019.02.020.
- [71] F. G. Bellagambi, T. Lomonaco, P. Salvo, F. Vivaldi, M. Hangouët, S. Ghimenti, D. Biagini, F. Di Francesco, R. Fuoco, A. Errachid, *TrAC Trends Anal. Chem.* **2020**, 124, 115781. DOI: 10.1016/j.trac.2019.115781.
- [72] R. González-Martín, F. A. e Silva, M. J. Trujillo-Rodríguez, D. D. Díaz, J. Lorenzo-Morales, M. G. Freire, V. Pino, *Green Chem.* **2023**, 25, 8544–8557. DOI: 10.1039/D3GC02046K.
- [73] W. Wojnowski, M. Tobiszewski, F. Pena-Pereira, E. Psillakis, *TrAC Trends Anal. Chem.* **2022**, 149, 116553. DOI: 10.1016/j.trac.2022.116553.
- [74] Á. I. López-Lorente, F. Pena-Pereira, S. Pedersen-Bjergaard, V. G. Zuin, S. A. Ozkan, E. Psillakis, *TrAC Trends Anal. Chem.* **2022**, 148, 116530. DOI: 10.1016/j.trac.2022.116530.

>

***Francisca A. e Silva**

Departamento de Química, Universidade de Aveiro.

CICECO - Instituto de Materiais de Aveiro.

Investigadora Júnior no CICECO e no Departamento de Química da Universidade de Aveiro, concluiu o Doutoramento em Engenharia Química, com distinção, na mesma instituição em 2018. Foi distinguida com o prémio de “Melhor Tese de Doutoramento em Engenharia Química” pelo Congresso Ibero-Americano de Engenharia Química. Desenvolve investigação em líquidos iónicos, com foco em processos de extração sustentáveis aplicados à saúde e à melhoria de estratégias bioanalíticas em diagnósticos clínicos.

francisca.silva@ua.pt

orcid.org/0000-0001-6735-5437

>

Inês B. Santana

Departamento de Química, Universidade de Aveiro.

CICECO - Instituto de Materiais de Aveiro. Licenciada em Biologia pela Universidade de Coimbra e Mestre em Biotecnologia pela Universidade de Aveiro. O seu percurso de investigação centrou-se na aplicação de sistemas aquosos bifásicos no pré-tratamento de soro humano e na extração de biomarcadores.

inessantana98@ua.pt

CIENCIAID F717-8954-8969

>

Mara G. Freire

Departamento de Química, Universidade de Aveiro.

CICECO - Instituto de Materiais de Aveiro.

Investigadora Coordenadora no CICECO e no Departamento de Química da Universidade de Aveiro. Vice-Diretora do CICECO e Vice-Presidente do Conselho Científico da Universidade de Aveiro. Membro da Academia Europeia de Ciências e da Academia das Ciências de Lisboa. Os seus interesses de investigação estão focados no desenvolvimento de processos de purificação economicamente viáveis para compostos de alto valor acrescentado.

maragfreire@ua.pt

ORCID.org/0000-0001-8895-0614

>

Maria S. M. Mendes

Departamento de Química, Universidade de Aveiro.

CICECO - Instituto de Materiais de Aveiro.

Mestre em Bioquímica pela Universidade de Aveiro, é atualmente estudante do Programa Doutoral em Engenharia Química na mesma instituição. A sua investigação foca-se no desenvolvimento de métodos alternativos para o pré-tratamento de amostras biológicas e dispositivos *point-of-care* destinados à deteção de biomarcadores tumorais.

msilvinamm@ua.pt

ORCID.org/0000-0001-6631-9821

Uma Nova Abordagem para a **Terapia do Cancro da Mama Metastático**

> João Franco Machado

A Novel Approach to Treat Metastatic Breast Cancer. *Metastatic breast cancer is one of the most common and lethal types of tumour worldwide. The median survival time of patients with metastatic breast cancer, upon diagnosis, is less than three years. Despite decades of efforts, there is still no cure, and the drugs currently available for treatment display severe adverse effects. Therefore, there is an urgent need to develop new precision therapies capable of targeting both the tumour and its metastases while sparing the healthy tissues to enhance the therapeutic efficacy with minimal side effects. In this work, novel “smart” ruthenium compounds were designed specifically to “hunt” cancer cells, by means of selective biodistribution, and to act only at the target (tumour/metastases) due to being inert during biodistribution but activated upon stimulus of the tumour microenvironment. The compounds developed proved to be highly promising in metastatic breast cancer cell models, paving the way for the development of an innovative therapeutic approach for this type of cancer.*

O cancro da mama metastático é a forma mais letal do tipo de tumor mais comum em todo o mundo. Em média, os doentes apenas sobrevivem até três anos após o diagnóstico. Apesar de décadas de investigação científica, ainda não existe uma cura e os medicamentos atualmente disponíveis para o tratamento apresentam efeitos secundários graves. Por isso, urge desenvolver novas terapias de precisão, capazes de atuar seletivamente nas células de cancro da mama e nas suas metástases, sem afetar os órgãos saudáveis, de forma a maximizar a eficácia terapêutica e minimizar os efeitos adversos. Neste trabalho, foram desenvolvidos novos compostos de ruténio “inteligentes”, desenhados especificamente para “caçarem” as células de cancro, através de uma biodistribuição seletiva, e para atuarem somente no alvo (tumor/metástases), por serem inertes durante a biodistribuição e ativados após um estímulo do microambiente tumoral. Os compostos desenvolvidos mostraram ser bastante promissores em modelos celulares de cancro da mama metastático, abrindo caminho para o desenvolvimento de uma abordagem terapêutica inovadora para este tipo de cancro.

O cancro da mama metastático é uma ameaça à saúde pública

O cancro é um dos principais problemas de saúde pública devido ao seu elevado impacto socioeconómico global, pelo que vigora na lista de prioridades da Organização Mundial de Saúde e da Organização das Nações Unidas. A cada ano, há mais de 20 milhões de novos diagnósticos de cancro, que levam a cerca de 10 milhões de mortes e acarretam um custo superior a 1,2 biliões de euros em despesas de saúde [1].

O cancro da mama é o tipo de tumor mais comum nas mulheres em todo o mundo. A cada minuto, são diagnosticados quatro novos casos e ocorre uma morte por esta doença. Apesar de décadas de investigação científica, ainda não existe uma cura, pelo que

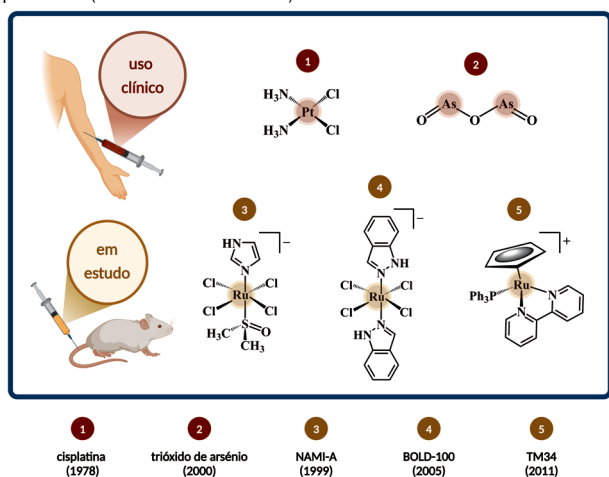
os tratamentos atuais visam retardar a progressão da doença. A grande maioria das mortes por cancro da mama deve-se à formação de metástases, isto é, quando o cancro se espalha para outros órgãos do corpo. De facto, o tempo de sobrevivência médio dos doentes com cancro da mama metastático após o diagnóstico é de apenas três anos. Os tratamentos atuais não são capazes de prevenir nem tratar eficazmente as metástases e ainda apresentam efeitos adversos graves, por possuírem baixa seletividade para as células de cancro face às células saudáveis do resto do corpo [2]. Por isso, a investigação de novos fármacos para tratar o cancro da mama metastático é de uma importância extrema.

Metalofármacos na linha-da-frente do combate ao cancro

Atualmente, existem mais de 100 fármacos para a quimioterapia do cancro. Destes, apenas quatro são classificados como metalofármacos, ou seja, possuem um metal na sua constituição química. No entanto, mais de metade dos doentes sob quimioterapia são tratados com metalofármacos, tais como a cisplatina ou o trióxido de arsénio (Figura 1), o que realça o seu papel-chave no combate ao cancro. O relativo sucesso clínico dos metalofármacos, em particular da cisplatina, inspiraram a comunidade científica a procurar novos medicamentos baseados em compostos contendo metais, que possam constituir alternativas clinicamente mais favoráveis [3].

Os complexos de ruténio têm emergido como candidatos a metalofármacos bastante promissores, sendo uma das classes de compostos contendo metais mais estudadas. As principais vantagens que apresentam, face à cisplatina, assentam na maior diversidade estrutural e de propriedades físico-químicas/farmacológicas, o que se traduziu na descoberta de vários compostos com maior atividade terapêutica, menor toxicidade e mecanismos de ação alternativos que permitem ultrapassar a resistência à terapia que ocorre frequentemente. Embora ainda nenhum metalofármaco de ruténio tenha obtido aprovação para uso clínico, alguns já alcançaram a fase de ensaios clínicos com bons resultados, como por exemplo o NAMI-A para o tratamento de metástases ou o BOLD-100 para o tratamento de tumores avançados (Figura 1) [4].

Figura 1 - Estrutura química de alguns metalofármacos para a quimioterapia do cancro em uso clínico (data de aprovação) ou em investigação clínica/pré-clínica (data de início de estudos).



Nos últimos anos, o grupo de investigação de Química Bioinorgânica do Centro de Química Estrutural da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa tem vindo a desenvolver alguns complexos de ruténio que mostraram ser promissores para o

tratamento do cancro da mama metastático, a um nível de investigação pré-clínica. Estes complexos, com base na estrutura ruténio(II)ciclopentadienilo, não só revelaram ser mais potentes do que a cisplatina em modelos animais, atuando por um mecanismo distinto (que envolve a membrana celular), como também apresentam a enorme mais-valia de aliar a atividade antitumoral à antimetastática num só composto [5]. Entre estes, o TM34 (Figura 1) foi um dos complexos que mais se destacou [6]. No entanto, apesar do elevado potencial terapêutico, apresenta os mesmos problemas de toxicidade que os fármacos utilizados na prática clínica, que resultam em efeitos adversos graves.

Serão os sistemas de entrega de metalofármacos o futuro do tratamento do cancro?

O trabalho reportado neste artigo visou ultrapassar as limitações apresentadas pelo TM34, que são um entrave à aplicação clínica, através da sua incorporação num sistema de entrega ao tumor/metástases, de forma a direcioná-lo seletivamente até ao alvo. Os sistemas de entrega de metalofármacos são abordagens inovadoras, que se enquadram no âmbito da medicina de precisão, tida atualmente como padrão de referência no tratamento do cancro [7].

Neste trabalho, foram desenvolvidos novos sistemas de entrega de metalofármacos de ruténio, através da conjugação de análogos do TM34 a péptidos específicos do recetor do fator de crescimento fibroblástico (FGFR). O FGFR é uma proteína frequentemente sobre-expressa na membrana das células de cancro da mama comparativamente com as células dos tecidos saudáveis. Esta proteína está associada à metastização, resistência à terapia e recidiva precoce do cancro da mama [8]. É de referir que o FGFR nunca havia sido explorado como alvo de uma unidade de entrega de metalofármacos, reforçando a inovação desta abordagem. Já a escolha de péptidos como vetores de direcionamento dos compostos até ao alvo assentou no facto de estes apresentarem elevada afinidade e seletividade para os seus recetores, poderem ser sintetizados com relativa facilidade e tenderem a não ser tóxicos para o organismo humano [9].

Os referidos conjugados ruténio-péptido (RuPCs) são então constituídos por três unidades: i) um complexo de ruténio baseado na estrutura do TM34 (unidade terapêutica); ii) um péptido específico do FGFR (unidade de entrega); iii) e um grupo espaçador entre ambos, que permite moldar algumas das propriedades físico-químicas e farmacológicas. Deste modo, os RuPCs foram desenhados para alcançarem apenas as células de cancro, poupando assim as células saudáveis e diminuindo a ocorrência de efeitos adversos por ação extra-alvo (Figura 2).

Primeiros conjugados rutênio(II) ciclopentadienilo-péptido da literatura

Como o mecanismo de ação do TM34 envolve a membrana das células de cancro, começou-se por determinar o modo de interação entre ambos através de estudos de dinâmica molecular, para compreender de que forma se poderia modificar a estrutura do TM34 sem perturbar a sua interação com a membrana celular. Com base nos resultados obtidos, sintetizou-se um novo complexo análogo do TM34 funcionalizado com um grupo ácido carboxílico no anel ciclopentadienilo. Como se de um aminoácido se tratasse, este complexo foi utilizado para a obtenção de vários RuPCs através da sua incorporação em diferentes péptidos específicos do FGFR, por via de síntese peptídica em fase sólida. Estes RuPCs possuem como grupo espaçador um pequeno polímero de polietilenoglicol que confere um aumento da solubilidade em água, o que é imprescindível para a aplicação clínica pretendida, já que facilita a preparação de soluções para administração ao doente. É importante referir que estes foram os primeiros conjugados rutênio(II)ciclopentadienilo-péptido alguma vez reportados na literatura [10].

Tanto a modificação estrutural efetuada no TM34 quanto a sua conjugação aos péptidos resultaram numa perda significativa da atividade anticancerígena, avaliada em modelos celulares de cancro da mama com diferentes níveis de expressão do FGFR. Contudo, a conjugação aos péptidos conduziu a um aumento de seletividade para as células de cancro da mama que sobre-expressam o FGFR. Os RuPCs eram, portanto, mais seletivos, mas menos ativos do que o TM34 [10].

Novos conjugados rutênio-péptido “inteligentes”

Para ultrapassar as limitações encontradas, foi necessário redesenhar a estrutura dos RuPCs considerando dois aspetos: i) a modificação estrutural do TM34 para conjugação aos péptidos não podia diminuir a atividade anticancerígena; ii) e os RuPCs deveriam ser capazes de libertar os complexos de rutênio no tumor, para que pudessem atuar. Por outras palavras, foi necessário tornar os RuPCs “inteligentes”, ou seja, capazes não só de “caçar” as células de cancro através de uma biodistribuição seletiva, mas também de libertar controladamente os complexos ativos somente no seu alvo (Figura 3). O microambiente tumoral possui propriedades únicas que o distinguem dos restantes tecidos saudáveis, tal como um pH mais ácido. Por isso, a substituição do espaçador por um grupo lábil ao pH do microambiente tumoral, mas estável ao pH da corrente sanguínea/tecidos saudáveis, como a hidrazona, permitiu alcançar a libertação controlada pretendida.

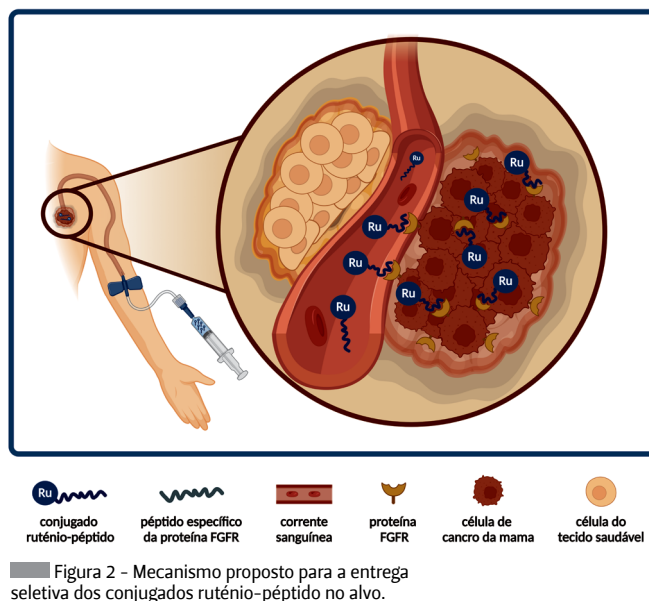


Figura 2 - Mecanismo proposto para a entrega seletiva dos conjugados rutênio-péptido no alvo.

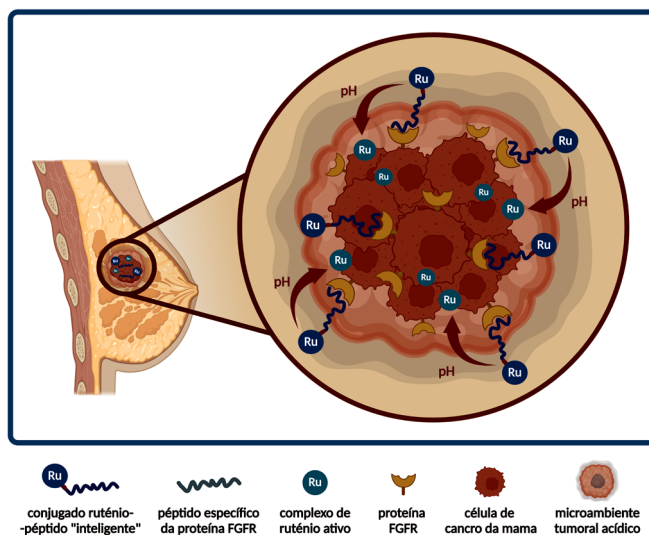


Figura 3 - Mecanismo proposto para a ativação seletiva dos conjugados rutênio-péptido “inteligentes” no microambiente tumoral.

Neste sentido, primeiro foram sintetizados novos complexos de rutênio análogos do TM34 funcionalizados com variados grupos cetona/hidrazida em diferentes posições. A caracterização estrutural, estudo por dinâmica molecular e avaliação num modelo celular de cancro da mama metastático permitiu selecionar os complexos com maior potencial terapêutico. Em paralelo, foram sintetizados novos péptidos específicos do FGFR derivatizados com os grupos químicos referidos, via síntese peptídica em fase sólida assistida por ultrassons. Esta é uma metodologia inovadora, pouco explorada, que permitiu preparar os péptidos com maior rendimento e pureza num menor período [11]. Da reação entre os complexos funcionalizados com um grupo cetona e os péptidos derivatizados com um grupo hidrazida, ou vice-versa, foram obtidos vários

RuPCs “inteligentes” que apenas diferiam na posição de conjugação ou na estrutura da hidrazona [12].

Tanto a estrutura da hidrazona quanto a posição de conjugação revelaram ter um contributo importante para o perfil de libertação dos complexos ativos a partir dos RuPCs, bem como para a atividade anticancerígena e seletividade dos RuPCs, avaliadas em modelos celulares de cancro da mama com diferentes níveis de expressão do FGFR e em fibroblastos não-tumorais, a valores de pH que mimetizam o microambiente tumoral ou os tecidos saudáveis. De facto, enquanto que uns RuPCs não mostraram ser adequados ao objetivo pretendido, outros revelaram um elevado potencial terapêutico, o que permitiu identificar algumas características estruturais responsáveis por esses resultados. Adicionalmente, foi identificado um RuPC com capacidade de libertar controladamente o complexo de ruténio ativo ao pH do microambiente tumoral, de uma forma que rivaliza com os principais sistemas de entrega de metalofármacos reportados na literatura, tendo-se verificado um aumento em seis vezes da atividade anticancerígena e no aumento em 10 vezes da seletividade para as células de cancro da mama que sobre-expressam o FGFR [12].

Primeiros passos rumo a uma nova abordagem terapêutica

O trabalho reportado neste artigo é de especial relevância não só pela descoberta de um composto com elevada eficácia terapêutica em modelos celulares de cancro da mama metastático, mas principalmente por ter aberto portas ao desenvolvimento de uma potencial nova abordagem terapêutica para esta doença.

Este será um longo percurso, mas cujos primeiros passos já foram dados. Atualmente, o composto líder encontra-se em fase de experimentação animal. Para além disso, as características-chave necessárias para produzir um sistema “inteligente” de entrega de metalofármacos, que foram descobertas neste trabalho, são também muito importantes não só para o aprimoramento do composto líder, mas sobretudo para o futuro desenvolvimento de uma segunda geração de compostos ainda mais eficazes.

É ainda de realçar a elevada inovação do trabalho aqui reportado, na medida em que os resultados obtidos serviram de base para uma patente internacional (W02023/199134). Adicionalmente, o grande impacto científico e social deste trabalho é também refletido pelo facto de ter sido selecionado duas vezes para ilustrar a capa da revista científica *Dalton Transactions* (editada pela *Royal Society of Chemistry*) e alvo de divulgação na comunicação social Portuguesa (jornal Público).

Agradecimentos

O trabalho divulgado neste artigo foi desenvolvido sob a orientação da Doutora Tânia Morais (Centro de Química Estrutural da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, CQE) e do Doutor João Correia (Centro de Ciências e Tecnologias Nucleares do Instituto Superior Técnico da Universidade de Lisboa, C²TN). O autor agradece à Fundação para a Ciência e a Tecnologia pelo financiamento atribuído através da bolsa de doutoramento SFRH/BD/135915/2018 e através dos projetos PTDC/QUI-QIN/0146/2020 (Arrows2Cancer), UIDB/00100/2020 (CQE) e UID/Multi/04349/2019 (C²TN).

Referências

- [1] F. Bray, M. Laversanne, H. Sung, J. Ferlay, R. L. Siegel, I. Soerjomataram, A. Jemal, *CA Cancer J. Clin.* **2024**, 74, 229–263. DOI: 10.3322/caac.21834.
- [2] S. Łukasiewicz, M. Czezelewski, A. Forma, J. Baj, R. Sitarz, A. Stanisławek, *Cancers* **2021**, 13, 4287–4316. DOI: 10.3390/cancers13174287.
- [3] V. M. Miranda, *Ver. Inorg. Chem.* **2022**, 42, 29–52. DOI: 10.1515/revic-2020-0030.
- [4] S. Y. Lee, C. Y. Kim, T. G. Nam, *Drug Des. Devel. Ther.* **2020**, 14, 5375–5392. DOI: 10.2147/DDDT.S275007.
- [5] T. S. Morais, A. Valente, A. I. Tomaz, F. Marques, M. H. Garcia, *Future Med. Chem.* **2016**, 8, 527–544. DOI: 10.4155/fmc.16.7.
- [6] A. I. Tomaz, T. Jakusch, T. S. Morais, F. Marques, R. F. M. Almeida, F. Mendes, E. A. Enyedy, I. Santos, J. C. Pessoa, T. Kiss, M. H. Garcia, *J. Inorg. Biochem.* **2012**, 117, 261–269. DOI: 10.1016/j.jinorgbio.2012.06.016.
- [7] J. F. Machado, T. S. Morais, *Dalton Trans.* **2022**, 51, 2593–2609. DOI: 10.1039/d1dt04079k.
- [8] Y. K. Chae, K. Ranganath, P. S. Hammerman, C. Vaklavas, N. Mohindra, A. Kalyan, M. Matsangou, R. Costa, B. Carneiro, V. M. Villalón, M. Cristofanilli, F. J. Giles, *Oncotarget* **2017**, 8, 16052–16074. DOI: 10.18632/oncotarget.14109.
- [9] C. Fu, L. Yu, Y. Miao, X. Liu, Z. Yu, M. Wei, *Acta Pharm. Sin. B.* **2023**, 13, 498–516. DOI: 10.1016/j.apsb.2022.07.020.
- [10] J. F. Machado, M. Machuqueiro, F. Marques, M. P. Robalo, M. F. M. Piedade, M. H. Garcia, J. D. G. Correia, T. S. Morais, *Dalton Trans.* **2020**, 49, 5974–5987. DOI: 10.1039/d0dt00955e.
- [11] R. D. M. Silva, J. F. Machado, K. Gonçalves, F. M. Lucas, S. Batista, R. Melo, T. S. Morais, J. D. G. Correia, *Molecules* **2021**, 26, 7349–7358. DOI: 10.3390/molecules26237349.
- [12] J. F. Machado, M. Sá, I. Pires, M. T. Silva, F. Marques, J. A. S. Coelho, F. Mendes, M. F. M. Piedade, M. Machuqueiro, M. A. Jiménez, M. H. Garcia, J. D. G. Correia, T. S. Morais, *Dalton Trans.* **2024**, 53, 7682–7693. DOI: 10.1039/d4dt00497c.

>

João Franco Machado

Faculdade de Farmácia da Universidade de Lisboa.

É Farmacêutico Residente no Serviço de Patologia Clínica da Unidade Local de Saúde de Lisboa Ocidental e Professor Auxiliar Convidado na Faculdade de Farmácia da Universidade de Lisboa. Desenvolve o seu trabalho de investigação nas áreas da Química Clínica e Química

Farmacêutica Inorgânica, procurando novas soluções terapêuticas para a patologia renal, cardiovascular ou oncológica. Em 2017 foi nomeado “*Highly Commended in Chemical and Pharmaceutical Sciences*” pelo Presidente da Irlanda. joaomachado@edu.ulisboa.pt
ORCID.org/0000-0003-3741-2386

Luz, Metal, Ação! A Sinergia de Macrociclos e Dansilo na Remediação Ambiental

> Inês Pereira-Gomes

Light, Metal, Action! The Synergy of Macrocycles and Dansyl in Environmental Remediation. *The presence of heavy metals and harmful anions in the environment poses significant challenges to human health and ecosystem preservation. This review explores innovative approaches to environmental remediation, with a focus on the synergy between macrocyclic compounds and dansyl-based fluorophores. Macrocyclic ligands such as cyclam and cyclen demonstrate high affinity and selectivity for various metal ions, while dansyl derivatives offer sensitive fluorescent detection of both metals and anions. The combination of these elements creates powerful tools for the detection, quantification, and potential removal of environmental contaminants, highlighting the selectivity and sensitivity of these chemosensors. Moreover, this review underscores the potential of macrocycle-dansyl systems in addressing pressing environmental concerns and paves the way for future developments in environmental monitoring and remediation technologies.*

A presença de metais pesados e de aniões nocivos no ambiente representa um desafio significativo para a saúde humana e para a preservação dos ecossistemas. Este artigo de revisão explora abordagens inovadoras para a remediação ambiental, com principal foco na sinergia entre compostos macrocíclicos e fluoróforos baseados em dansilamidas. Ligandos macrocíclicos como cyclam e cyclen demonstram alta afinidade e seletividade para vários iões metálicos, enquanto os derivados de dansilo oferecem detecção fluorescente sensível tanto para metais como para aniões. A combinação destes elementos origina ferramentas únicas para a detecção, quantificação e potencial remoção de contaminantes ambientais, destacando a seletividade e sensibilidade destes quimiossensores. Além disso, é sublinhado o potencial dos sistemas macrociclo-dansilo na abordagem de preocupações ambientais eminentes abrindo caminho para futuros desenvolvimentos em tecnologias de monitorização e remediação ambiental.

Introdução

Atualmente, a presença de metais pesados é um enorme problema de contaminação ambiental, conduzindo a desafios relacionados com a saúde humana e a preservação de ecossistemas [1].

Grande parte destas substâncias revelam comportamento persistente, tóxico e bioacumulativo no meio ambiente, uma vez que não sofrem degradação natural passando, assim, a exigir métodos eficazes para a sua deteção, quantificação e consequente remoção. Tendo em consideração as diversas abordagens possíveis, destaca-se a complexação seletiva. Este método envolve a interação ligando-metal/anião, através da qual são formados complexos com estabilidade significativa, viabilizando a sua separação e extração de meios contaminados [2,3].

Problema da contaminação por metais e aniões

Diversos metais pesados, como o mercúrio, o cádmio, o chumbo e o cobre são encontrados nos solos e meios aquosos (Figura 1) resultantes de diversas atividades humanas, incluindo a mineração, indústrias químicas e descartes inadequados de resíduos [4-8]. Relacionado com a prática de agricultura intensiva, destaca-se o uso de fertilizantes e pesticidas que levam à acumulação de fosfatos e impurezas de metais, como o cádmio e o chumbo, nos solos. A presença destes agentes gera sérios impactos na cadeia alimentar, na fertilidade dos solos e na saúde humana (Figura 2) [9,10].

O mercúrio, por exemplo, em meios aquáticos e organismos vivos, é convertido em metilmercúrio, tornando-se altamente tóxico, acumulando-se nos tecidos

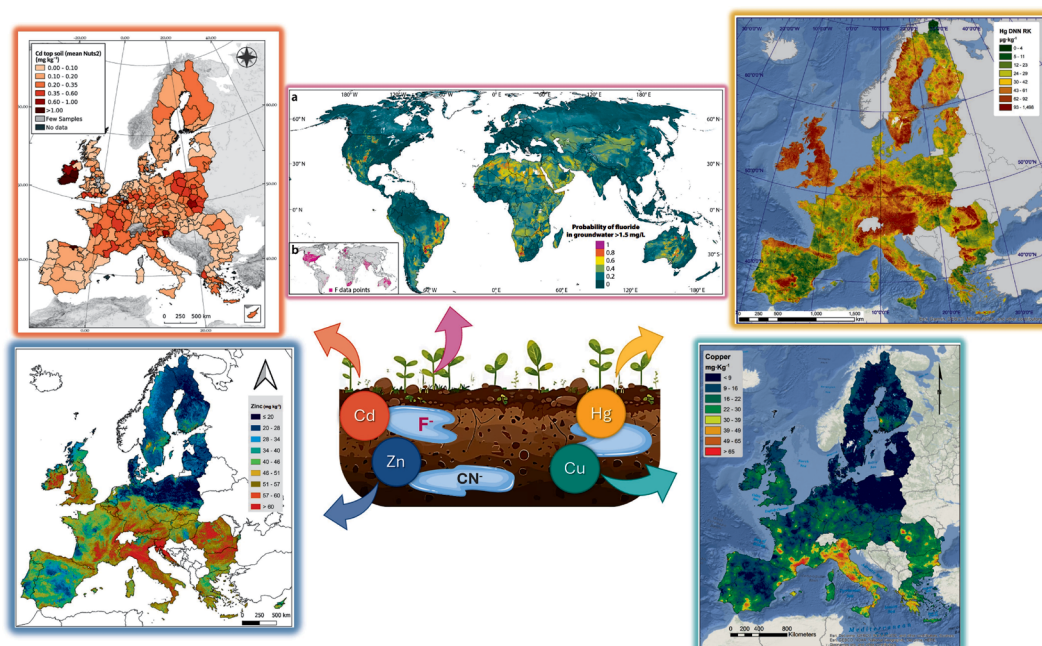


Figura 1 - Abundância de metais pesados, como o mercúrio, o cobre, o arsênio e o cádmio, e de anião cianeto na Europa [4-8] (reproduzido com a permissão das ref. [4-8]).

dos peixes e representando um risco significativo para a saúde humana através da cadeia alimentar. Como já reportado, este pode afetar a atividade neurológica e cardiovascular. O chumbo, por sua vez, é vulgarmente utilizado na indústria, todavia, a exposição prolongada a este metal pode causar danos a nível neurológico e imunológico. O cádmio possui também propriedades tóxicas e cancerígenas, podendo levar a problemas ósseos, cardiovasculares e hepáticos. A sua presença no meio ambiente ocorre principalmente devido à

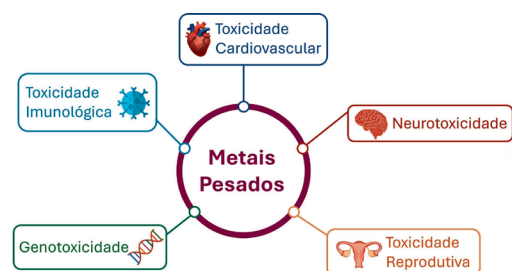


Figura 2 - Principais efeitos tóxicos de metais pesados no organismo humano.

poluição industrial e agrícola, sendo um contaminante vulgarmente encontrado na água e nos solos [11].

Além dos elementos já referidos, também o arsênio, o zinco e o cobre demonstram consequências no foro reprodutivo e neurológico, podendo levar à doença de Wilson para concentrações elevadas de cobre [12,13].

Por outro lado, aniões como nitratos e percloratos são também poluentes ambientais com relevância, associados à eutrofização e contaminação de águas subterrâneas [14,15].

Face ao exposto, torna-se essencial o desenvolvimento de estratégias de remediação e monitorização ambiental.

Agentes de complexação

Substâncias químicas, como o ácido etilenodiaminotetracético (EDTA), o ácido nitrilotriacético (NTA) e o ácido dietilenotriaminopentacético (DTPA), ilustradas na Figura 3, são amplamente utilizadas na captura de metais pesados em tratamento de águas e remediação ambiental. Isto deve-se ao facto de promoverem uma forte interação metal-ligando, intimamente relacionada com dois fatores: a presença de átomos doadores com elevada afinidade para o centro metálico e o carácter aniónico que contribui também para a estabilização do complexo [16].

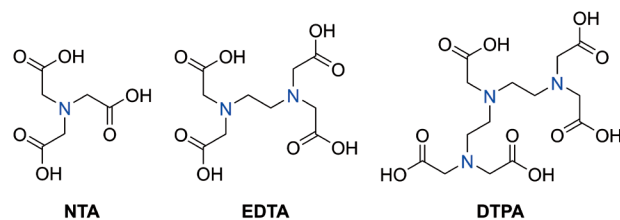


Figura 3 - Estruturas químicas dos agentes quelantes NTA, EDTA e DTPA.

O EDTA, composto por quatro grupos carboxilo e dois grupos amina, origina complexos de elevada estabilidade com centro metálicos como Pb(II), Cu(II) e Fe(III) [17,18]. Esta estabilidade é atribuída à sua estrutura octaédrica de coordenação, tornando-o ideal para aplicações na descontaminação de solos e no âmbito da medicina, nomeadamente na terapia

para desintoxicação por metais pesados [19]. No entanto, a sua baixa biodegradabilidade compromete as questões ambientais, levando à procura de alternativas mais sustentáveis.

O NTA, estruturalmente semelhante ao EDTA, mas com apenas três grupos carboxilo, leva à formação de complexos menos estáveis. Todavia, o seu carácter biodegradável leva a que seja preferível relativamente a detergentes industriais, reduzindo a persistência no meio ambiente [20,21].

Quanto ao DTPA, constituído por cinco grupos carboxilo e três grupos amina, exhibe maior afinidade por metais de transição e lantanídeos, demonstrando maior aplicabilidade na indústria nuclear para a descontaminação radioativa e remoção de metais como o urânio e o plutónio [22,23].

A utilização destes agentes quelantes tem sido extensivamente estudada para a remoção de metais pesados de solos contaminados, promovendo a extração eficiente de poluentes. Diversos estudos demonstraram que a combinação de EDTA com técnicas de fitorremediação pode conduzir ao aumento da mobilização e absorção de metais por plantas hiperacumuladoras, tornando o processo mais eficiente [17,24,25].

Apesar da sua utilidade, estes agentes quelantes apresentam desafios ambientais, especialmente em relação à sua persistência no meio ambiente e potencial de mobilização de metais para massas de água subterrâneas [26]. Assim, diversas estruturas macrocíclicas têm vindo a ser desenvolvidas, entre elas, o *cyclam* (1,4,8,11-tetraazaciclotetradecano) e o *cyclen* (1,4,7,10-tetraazaciclododecano) (Figura 4) por forma a ultrapassar as desvantagens associadas aos agentes quelantes tradicionais já mencionados.

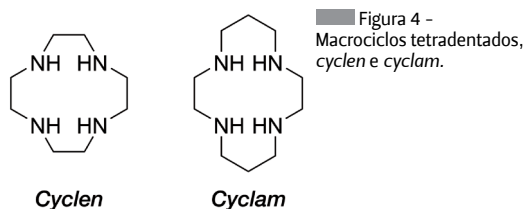
Os compostos azamacrocíclicos, como *cyclam* e *cyclen*, têm sido estudados no âmbito da química de coordenação devido à sua estrutura tetradentada, que possibilita a complexação eficiente de catiões metálicos. O *cyclam* apresenta elevada afinidade por centros metálicos como Cu(II), Fe(III), Ni(II) e Zn(II) devido ao efeito macrocíclico, que resulta da combinação de fatores entálpicos e entrópicos, estabilizando os complexos formados [27-29]. Esta propriedade tem impulsionado a sua aplicação em diversas áreas, inclusive em sensores químicos, catálise e medicina, nomeadamente, na radioterapia e imagiologia molecular e como agentes anti-HIV [30-32]. Complexos de cobre-64 são aplicados em tomografia por emissão de positrões (PET *Imaging*), permitindo a deteção precisa de tumores [33-35].

Já a unidade *cyclen* destaca-se pela sua elevada seletividade e afinidade adicional para iões lantanídeos como La(III), Eu(III) e Gd(III). Estes complexos desempenham um papel fundamental no desenvolvimento de agentes de contraste para ressonância magnética

(MRI), bem como em sistemas de reconhecimento molecular, imagem e catálise [36].

Fluoróforos aplicados à deteção de metais e aniões

A deteção de metais e de aniões é essencial para a monitorização ambiental, controle de qualidade industrial e aplicações biomédicas devendo, por isso, ser efetuada recorrendo a métodos de elevada sensibilidade e seletividade. Entre as abordagens mais eficazes, destacam-se os sensores de fluorescência [37-40]. Estes operam com base na capacidade de determinadas moléculas, denominados fluoróforos, absorverem luz num dado comprimento de onda e, em consequência, emitirem luz. O princípio fundamental adjacente envolve a excitação eletrónica do fluoróforo, seguida da emissão de fluorescência durante o regresso dos eletrões ao estado fundamental [40].



Estas moléculas, ao interagirem com um analito – por exemplo, de natureza metálica ou aniónica – podem provocar alterações nas suas propriedades fotoquímicas, como a intensidade ou o deslocamento do comprimento de onda, permitindo, assim, a deteção e quantificação do analito. Neste âmbito, a espectroscopia de fluorescência apresenta elevada sensibilidade e seletividade, permitindo a deteção de analitos ainda que em baixas concentrações [40].

Assim, diversos fluoróforos têm sido estudados e aplicados tendo em vista esta finalidade, nomeadamente, a dansilamida [41-48]. Este composto, derivado do grupo dansilo, possui características estruturais e espectroscópicas únicas, como elevado rendimento quântico de fluorescência, significativo deslocamento de Stokes e estabilidade fotoquímica e térmica, levando a que seja amplamente estudada [49,50]. Além disso, a facilidade na sua modificação estrutural viabiliza a síntese de sensores fluorescentes específicos para diferentes analitos, entre eles metais e aniões, cujas interações levam a modificações nas suas propriedades fotofísicas. Esta versatilidade torna esta unidade essencial no desenvolvimento de sensores para a deteção de espécies de interesse ambiental e industrial.

Na Figura 5 encontram-se diferentes derivados de dansilamida com propriedades distintas. Chia-Lin Li *et al.* sintetizaram o composto **L1**, o qual na ausência de Pb(II), exhibe uma emissão intensa, característica do fluoróforo dansilo. No entanto, na presença do ião

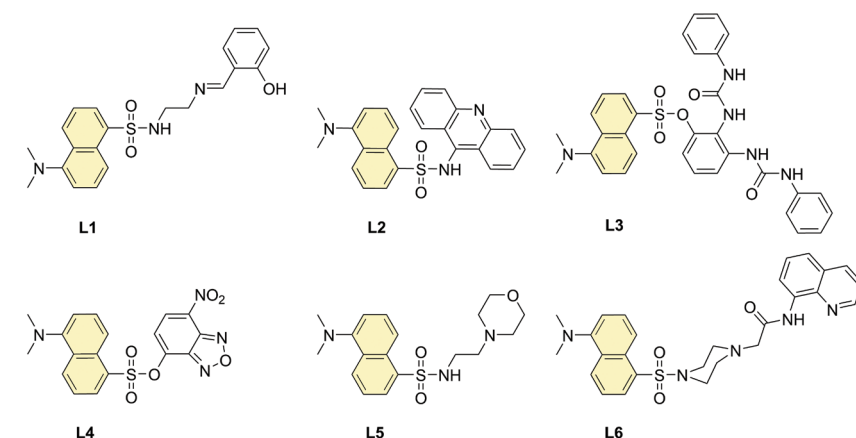


Figura 5 - Derivados de dansilamida L1-L6.

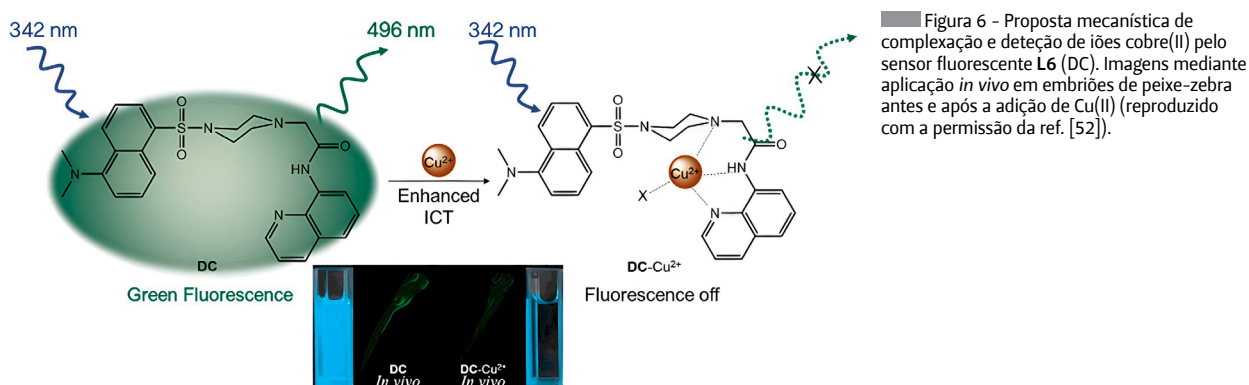


Figura 6 - Proposta mecanística de complexação e detecção de íons cobre(II) pelo sensor fluorescente L6 (DC). Imagens mediante aplicação *in vivo* em embriões de peixe-zebra antes e após a adição de Cu(II) (reproduzido com a permissão da ref. [52]).

chumbo, observa-se um significativo decréscimo da fluorescência devido à interrupção do ICT (*Intramolecular Charge Transfer*), um mecanismo típico em sensores fluorescentes baseados em supressão de fluorescência (*quenching*). Este comportamento sugere uma forte interação do metal com o ligando, levando à supressão da emissão. Os testes de seletividade evidenciaram que o sensor responde preferencialmente a Pb(II), sem interferências significativas de outros centros metálicos abundantes como Na(I), K(I), Ca(II) e Mg(II). Adicionalmente, devido aos limites de detecção (LOD) e quantificação (LOQ), determinados na ordem de nanomolar, a aplicabilidade do sensor foi testada em amostras reais de água, onde os resultados mostraram excelente recuperação e reprodutibilidade [51].

Na vertente da detecção de metais pesados, foi desenvolvido o L5, tendo-se verificado a sua sensibilidade na presença de mercúrio. A interação entre o sensor e mercúrio resulta num efeito de *quenching* de emissão, permitindo a quantificação do metal em solução. Zhou *et al.* exploraram as propriedades espectroscópicas do composto, avaliando a sua seletividade em relação a outros cátions metálicos. Os resultados indicam que o sensor possui alta especificidade para Hg(II) e pode ser utilizado em condições ambientais variadas [44].

Chae *et al.* apresentaram também um novo quimiossensor fluorescente integrando o cromóforo dansilamida

L6 (DC) para a detecção de íons cobre(II) [52]. Este sensor químico demonstrou elevada seletividade para Cu(II) com um limite de detecção de 43 nM, excelente reversibilidade e resposta rápida, funcionando numa ampla faixa de pH (6-9). Este cromóforo opera por um método de detecção fluorescente “on-off”, *i.e.*, a adição de Cu(II) leva a uma mudança de cor de incolor para cor-de-rosa, tornando-o um indicador adequado para detecção a olho nu, acompanhado da supressão de fluorescência aquando da complexação metálica na proporção 1:1 (Figura 6). A aplicabilidade deste sensor foi estudada em amostras de água, sendo utilizado para quantificar a presença de Cu(II) em amostras de água da torneira, água potável e água poluída artificialmente. Além disso, L6 foi capaz de monitorizar a presença destes íons metálicos em organismos vivos, sendo aplicado em peixes-zebra. Deste modo, o quimiossensor L6 representa um avanço significativo na detecção de íons cobre(II) em soluções aquosas e organismos vivos [52].

Além da sensibilidade apresentada pela subunidade dansilamida perante íons metálicos, esta apresenta também elevada sensibilidade frente a aniões, como cianeto, fluoreto, azida, entre outros, dependendo da modificação estrutural introduzida.

No nosso grupo de investigação, Duarte *et al.* [53] demonstraram a capacidade deste fluoróforo na detecção seletiva de aniões, em particular de cianeto (CN⁻), que

desencadeia um efeito *turn-on* na fluorescência do sensor **L2**. Este sensor, constituído por subunidades dansilo e acridina, demonstrou elevada sensibilidade e seletividade para CN^- em meio orgânico. O estudo espectroscópico revelou que a adição de CN^- promove um aumento significativo na fluorescência, com deslocamento no comportamento emissivo devido à reorganização eletrónica (Figura 7). Além disso, foram efetuados testes comparativos com outros aniões, como fluoreto (F^-), brometo (Br^-) e cloreto (Cl^-), tendo-se verificado que apenas o anião cianeto e, em menor grau, o anião fluoreto, foram capazes de induzir uma resposta fluorescente significativa.

A síntese de sondas óticas é, portanto, bastante promissora no que toca à monitorização não só ambiental, mas também, possivelmente, a nível biológico. Assim, H. Al-Sayah *et al.* exploraram a deteção seletiva de aniões monovalentes e divalentes por meio do sensor **L3**, que combina um fluoróforo de dansilo com grupos bis-ureia, que atuam como sítios de coordenação para aniões através de interações por ligações de hidrogénio. A presença de aniões como carboxilato, oxalato, cianeto e di-hidrogenofosfato induz alterações na fluorescência da sonda. Ensaio de absorção na gama UV-Vis confirmaram mudanças espectrais significativas na presença destes aniões, enquanto estudos de RMN revelaram deslocamentos químicos dos prótons NH, evidenciando interações fortes com os aniões de carácter mais básico [41].

Por fim, com base num derivado de dansilo-nitro-benzoxadiazol (dansilo-NBD), foi desenvolvido **L4** para a deteção seletiva de azida (N_3^-) em solução. Jeon *et al.* demonstraram que a seletividade da sonda pode ser ajustada modificando a percentagem de água no meio de deteção [54]. Em meios ricos em água ($\text{H}_2\text{O}/\text{THF} = 99:1$, v/v), a sonda reage preferencialmente com S^{2-} , promovendo a clivagem do grupo $\text{NBD-OSO}_2\text{Ar}$, originando produtos corados fluorescentes. Já em meios com menor teor de água ($\text{H}_2\text{O}/\text{THF} = 10:90$, v/v), ocorre a reação com N_3^- , formando NBD-N^- , que exibe uma forte

emissão de fluorescência a 528 nm. O estudo validou ainda a sua aplicação prática através de tiras de teste impregnadas com a sonda, permitindo a deteção visual de S^{2-} e N_3^- em soluções reais. Este trabalho destaca a versatilidade da dansilamida-NBD como ferramenta promissora para sensores ambientais e biológicos.

Dualidade fluoróforos - agentes quelantes

A conjugação de fluoróforos a agentes macrocíclicos como o *cyclen* e o *cyclam* tem sido amplamente explorada para a deteção e quantificação de iões metálicos e moléculas biológicas [55,56]. Os macrociclos exibem cavidades estruturadas que favorecem a complexação de analitos, enquanto os fluoróforos permitem a monitorização ótica das interações. Esta dualidade fluoróforo-quelante viabiliza então uma resposta específica e rápida, revelando-se bastante promissora. Na Figura 8 estão ilustrados diversos sensores desenvolvidos pela integração do fluoróforo dansilamida em sistemas de *cyclen* e *cyclam*.

A quantificação seletiva de iões Zn(II) em sistemas biológicos é um desafio devido à sua baixa concentração e à interferência de outros metais. Num estudo de Koike *et al.* sintetizou-se e caracterizou-se um novo fluoróforo baseado na subunidade *cyclen* funcionalizado com um grupo dansilamida (**L7**) [57]. Este formou complexos bastante estáveis com zinco, na ordem de concentrações micromolares a pH fisiológico, destacando-se como uma ferramenta altamente eficiente para quantificação de zinco em sistemas ambientais e biológicos.

Variações do sistema *cyclen*-dansilamida têm sido investigadas. Paderni *et al.* demonstraram um sistema bissubstituído (**L8**), ao invés dos anteriores (monosubstituídos), possuindo propriedades espectroscópicas distintas [58]. Perante uma vasta gama de iões metálicos em meio orgânico, verificou-se um *quenching* mais pronunciado na emissão na presença de zinco, cádmio, cobre e paládio (Figura 9). Devido à solubilidade deste ligando em meio aquoso, foi possível monitorizar a autofagia e o tráfego vesicular, deixando em aberto a possibilidade de monitorizar simultaneamente a presença de iões metálicos.

Figura 7 - Titulação espectrofotométrica e espectrofluorimétrica do composto **L2** na presença de adições crescentes do ião cianeto. [**L2**] = 10 μM , T = 298 K (reproduzido com a permissão da ref. [53]).

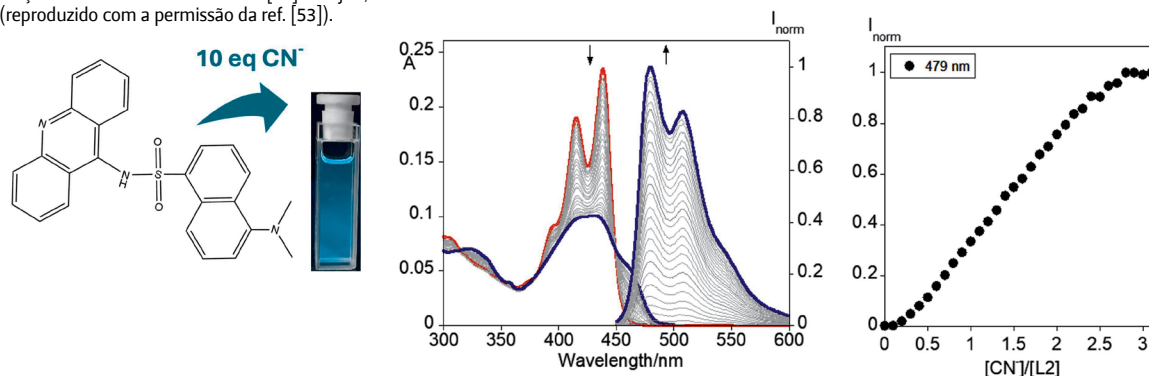


Figura 8 - Derivados de cyclen-dansilamida e cyclam-dansilamida, L7-L11.

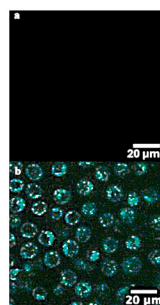
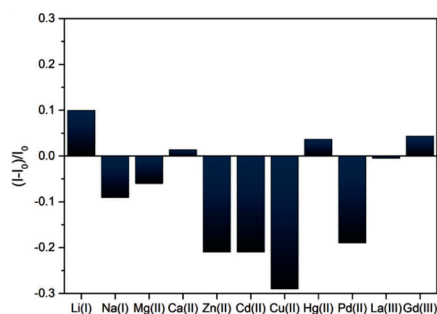
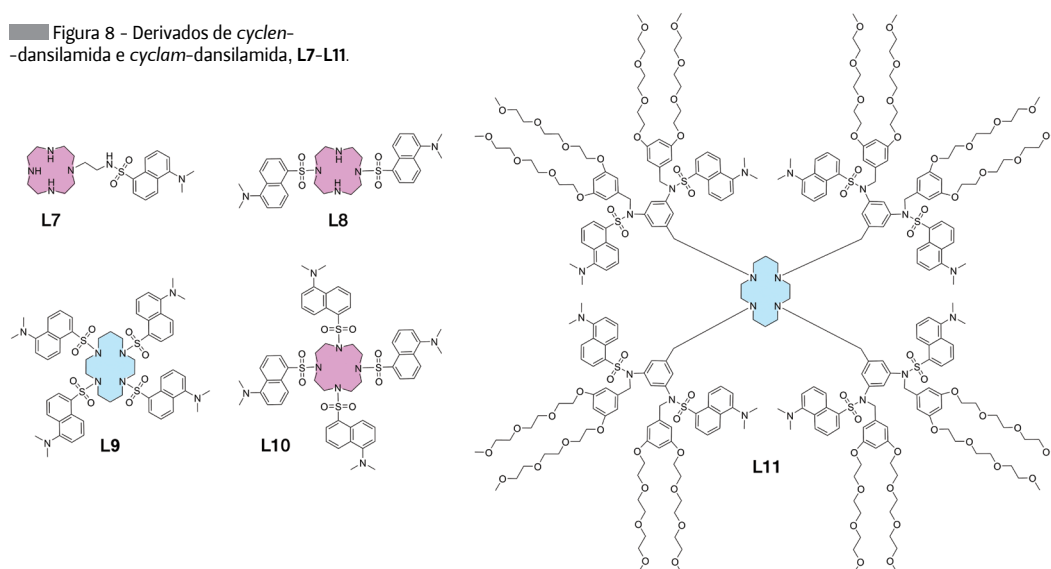


Figura 9 - Alteração de propriedades emissivas de L8 em dioxano após a adição de diferentes íons metálicos (1 equiv.). [L8] = 10 μM, λ_{exc} = 335 nm. Imagens de microscopia confocal de células HT-29: não marcadas (a) e L8-marcadas (b) (reproduzido com a permissão da ref. [58]).

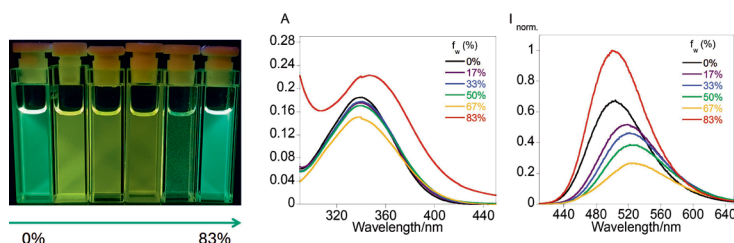


Figura 10 - Comportamento absorptivo e emissivo de L10 em diferentes frações de água (0, 17, 33, 55, 67 e 83%). [L10] = 10 μM (reproduzido com a permissão da ref. [59]).

Recentemente, Pereira-Gomes *et al.* exploraram a integração de cyclen integrando também a estrutura cyclam, juntamente com dansilamida, resultando nos compostos tetrassubstituídos **L9** e **L10**, ilustrados na Figura 8 [59]. Estes compostos possuem elevados rendimentos quânticos de fluorescência, uma característica essencial para aplicações no âmbito da detecção sensível de metais e aniões. Além disso, exibem solubilidade numa gama diversa de solventes orgânicos, evidenciando um marcado comportamento solvatocrômico e elevada estabilidade térmica, tornando-os adequados para diversas aplicações analíticas e ambientais. **L10** demonstrou um aumento significativo da sua fluorescência em soluções predominantemente aquosas, um comportamento característico do efeito AIE (Aggregation Induced Emission). A Figura 10 mostra que o aumento da fração de água no solvente orgânico promove uma amplificação da fluorescência, atingindo

a sua intensidade máxima em composições com ca. 80% de água. Este facto é crucial para aplicações em monitorização de contaminantes em ambientes biológicos e aquáticos, pois permite a deteção eficiente de analitos em sistemas predominantemente aquosos.

Adicionalmente, ambos os derivados apresentaram seletividade perante os íons metálicos Hg(II) e Cu(II), promovendo mudanças espectroscópicas semelhantes (Figura 11). Mediante análise da espectroscopia de UV-Vis e de fluorescência, foi verificada a diminuição da fluorescência, indicando a formação de complexos estáveis entre os sensores e os íons metálicos, com uma estequiometria predominante 1:1, todavia, com maior magnitude para a complexação com Cu(II). Relativamente à capacidade de deteção e quantificação destes sistemas, verificou-se que ambos os limites se encontram na ordem de 2–3,5 μM e 3–4,4 μM, respetivamente.

Aliado à notória capacidade de coordenação de

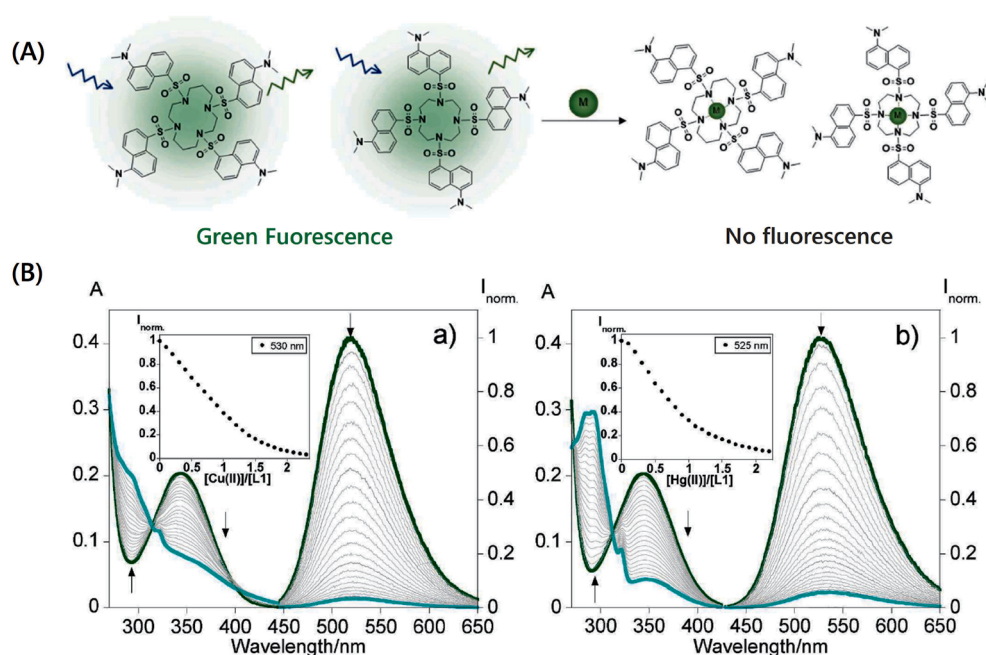


Figura 11 - (A) Representação da coordenação metálica a L9 e L10 e consequência na fluorescência após complexação com Cu(II) e Hg(II); (B) Titulação de L9 na presença de Cu(II) e Hg(II) (reproduzido com a permissão da ref. [59]).

cyclen e *cyclam*, Branchi *et al.* aliaram a engenharia molecular de dendrímeros a estes sistemas, permitindo a criação de estruturas altamente organizadas e multifuncionais [60]. Neste estudo, foi sintetizado um dendrímero baseado em *cyclam*, funcionalizado com oito unidades dansilamida e cadeias de oligoetileno glicol (L11). Esta estrutura combina propriedades únicas, oferecendo três tipos de sítios de coordenação multivalentes: o núcleo de *cyclam*, os grupos amina das unidades dansilamida e as cadeias periféricas. O sistema demonstrou notável seletividade na complexação de íons metálicos divalentes (Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II)) e trivalentes (Nd(III), Eu(III), Gd(III)), sendo o *cyclam* o sítio preferencial de coordenação ao metal. A interação entre o átomo metálico e as unidades dansilo alterou significativamente a fluorescência, realçando o potencial deste sistema dendrítico na detecção de metais, na catálise e na bioimagem.

Considerações finais

A contaminação por metais pesados e aniões representa um desafio ambiental e de saúde pública significativo, exigindo o desenvolvimento de métodos eficientes para as suas detecção e remoção. Neste contexto, a complexação seletiva surge como uma abordagem promissora, permitindo a separação e extração controlada de espécies contaminantes através da formação de complexos estáveis com agentes quelantes específicos.

Os macrociclos *cyclen* e *cyclam* demonstraram elevada eficácia na coordenação de íons metálicos de metais de transição e transição interna, favorecendo a formação de complexos de elevada estabilidade, estendendo a sua aplicabilidade a áreas como a catálise

e a terapias médicas, destacando-se no desenvolvimento de sensores para a detecção seletiva de metais.

A conjugação de fluoróforos a macrociclos revelou-se uma estratégia eficiente para melhorar a sensibilidade e seletividade na detecção de metais e aniões, possibilitando respostas óticas mensuráveis. Fluoróforos como a dansilamida apresentam vantagens significativas, incluindo elevada fluorescência e capacidade de modificação estrutural, permitindo a conceção de sensores específicos para diferentes analitos.

A investigação e o aperfeiçoamento contínuos destes sistemas são essenciais para melhorar a precisão e a robustez de metodologias de detecção, abrindo caminho para aplicações com crescente eficácia na monitorização ambiental.

Agradecimentos

Agradeço ao LAQV-REQUIMTE – NOVA FCT – Universidade NOVA de Lisboa, à Associação Científica PROTEOMASS, ao Grupo de Investigação BIOSCOPE por me integrar na ciência durante o meu trabalho de fim de curso e de tese de mestrado. Agradeço ainda aos colaboradores Prof. Atanas Kurutos e Prof. Georgi Dobrikov da Academia de Ciências Búlgara, ao Prof. Carlos Lodeiro, Prof. José Luis Capelo-Martínez e a todos os membros do grupo BIOSCOPE.

Referências

- [1] R. Baritz, W. Amelung, V. Antoni, J. Boardman, R. Horn, G. Prokop, J. Römbke, P. Romkens, B. Steinhoff-Knopp, F. Swartjes, M. Trombetti, W. De Vries, "Soil Monitoring in Europe: Indicators and Thresholds for Soil Quality Assessments", *Publications Office of the European Union* **2023**. DOI: 10.2800/956606.

- [2] Y. Guo, H. Feng, L. Zhang, Y. Wu, C. Lan, J. Tang, J. Wang, L. Tang, *Environ. Sci. Technol.* **2024**, 58, 5589–5597. DOI: 10.1021/acs.est.3c10553.
- [3] K. Meng, Y. Dong, J. Liu, J. Xie, Q. Jin, Y. Lu, H. Lin, J. *Environ. Chem. Eng.* **2025**, 13, 116099. DOI: 10.1016/j.jece.2025.116099.
- [4] P. Panagos, M. Jiskra, P. Borrelli, L. Liakos, C. Ballabio, *Environ. Res.* **2021**, 201, 111556. DOI: 10.1016/j.envres.2021.111556.
- [5] E. Van Eynde, A. N. Fendrich, C. Ballabio, P. Panagos, *Sci. Total Environ.* **2023**, 892, 164512. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2023.164512.
- [6] C. Ballabio, A. Jones, P. Panagos, *Sci. Total Environ.* **2024**, 912, 168710. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2023.168710.
- [7] C. Ballabio, P. Panagos, E. Lugato, J.-H. Huang, A. Orgiazzi, A. Jones, O. Fernández-Ugalde, P. Borrelli, L. Montanarella, *Sci. Total Environ.* **2018**, 636, 282–298. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2018.04.268.
- [8] C. Ballabio, M. Jiskra, S. Osterwalder, P. Borrelli, L. Montanarella, P. Panagos, *Sci. Total Environ.* **2021**, 769, 144755. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2020.144755.
- [9] F. Fu, Q. Wang, *J. Environ. Manag.* **2011**, 92, 407–418. DOI: 10.1016/j.jenvman.2010.11.011.
- [10] W. Ahmad, R. D. Alharthy, M. Zubair, A. Ahmed, A. Hameed, S. Rafique, *Sci. Rep.* **2021**, 11, 17006. DOI: 10.1038/s41598-021-94616-4.
- [11] S. Mitra, A. J. Chakraborty, A. M. Tareq, T. B. Emran, F. Nainu, A. Khuro, A. M. Idris, M. U. Khandaker, H. Osman, F. A. Alhumaydhi, J. Simal-Gandara, *J. King Saud. Univ. Sci.* **2022**, 34, 101865. DOI: 10.1016/j.jksus.2022.101865.
- [12] R. A. Wuana, F. E. Okieimen, *ISRN Ecol.* **2011**, 402647. DOI: 10.5402/2011/402647.
- [13] M. Balali-Mood, K. Naseri, Z. Tahergorabi, M. R. Khazdair, M. Sadeghi, *Front. Pharmacol.* **2021**, 12, 643972. DOI: 10.3389/fphar.2021.643972.
- [14] J. Podgorski, M. Berg, *Nat. Commun.* **2022**, 13, 4232. DOI: 10.1038/s41467-022-31940-x.
- [15] C. R. Lovasoa, K. Hela, A. A. Harinaivo, Y. Hamma, *Afr. J. Environ. Sci. Tech.* **2017**, 11, 272–291. DOI: 10.5897/ajest2016.2264.
- [16] A. Kovács, D. S. Nemcsok, T. Kocsis, *THEOCHEM* **2010**, 950, 93–97. DOI: 10.1016/j.theochem.2010.03.036.
- [17] A. L. Epstein, C. D. Gussman, M. J. Blaylock, U. Yermiyahu, J. W. Huang, Y. Kapulnik, C. S. Orser, *Plant Soil* **1999**, 208, 87–94. DOI: 10.1023/A:1004539027990.
- [18] Saifullah, E. Meers, M. Qadir, P. de Caritat, F. M. G. Tack, G. Du Laing, M. H. Zia, *Chemosphere* **2009**, 74, 1279–1291. DOI: 10.1016/j.chemosphere.2008.11.007.
- [19] A. E. Martell, R. D. Hancock, “Metal Complexes in Aqueous Solutions”. J. P. Fackler Jr. (ed.), Springer US: Boston, MA, **1996**. DOI: 10.1007/978-1-4899-1486-6.
- [20] N. H. Baek, N. L. Clesceri, *Water Res.* **1986**, 20, 345–349. DOI: 10.1016/0043-1354(86)90082-5.
- [21] M. Malanowska, M. Jedra, *Rocz Panstw Zasl Hig.* **1996**, 47, 247–256. PMID: 9026891.
- [22] L. Zhang, C. Nie, Y. Zhang, C.-C. Liu, H. Jiang, L.-H. Cai, Y. Xiao, R. Li, M.-H. Liu, *ACS Appl. Polym. Mater.* **2024**, 6, 8570–8584. DOI: 10.1021/acsp.4c01524.
- [23] S. Dumit, M. Avtandilashvili, D. J. Strom, S. L. McComish, G. Tabatadze, S. Y. Tolmachev, *Radiat. Res.* **2018**, 191, 201–210. DOI: 10.1667/RR15188.1.
- [24] Q. Wang, J. Chen, A. Zheng, L. Shi, *Chemosphere* **2019**, 220, 1200–1207. DOI: 10.1016/j.chemosphere.2018.12.212.
- [25] H. Grčman, J. Persolja, F. Lobnik, D. Leštan, *Fresenius Environ. Bull.* **2001**, 10, 727–730.
- [26] C. Peraferrer, M. Martínez, J. Poch, I. Villaseca, *Arch. Environ. Contam. Toxicol.* **2012**, 63, 484–494. DOI: 10.1007/s00244-012-9788-x.
- [27] G. Bergamini, E. Marchi, P. Ceroni, *Coord. Chem. Rev.* **2011**, 255, 2458–2468. DOI: 10.1016/j.ccr.2011.01.022.
- [28] A. Kovács, Z. Varga, *Struct. Chem.* **2021**, 32, 1719–1731. DOI: 10.1007/s11224-021-01816-9.
- [29] L. M. P. Lima, D. Esteban-Gómez, R. Delgado, C. Platas-Iglesias, R. Tripiér, *Inorg. Chem.* **2012**, 51, 6916–6927. DOI: 10.1021/ic300784v.
- [30] E. K. Barefield, *Coord. Chem. Rev.* **2010**, 254, 1607–1627. DOI: 10.1016/j.ccr.2010.03.007.
- [31] “Perspectives on Bioinorganic Chemistry”, R. W. Hay, J. R. Dilworth, K. B. Nolan (eds.), *JAI PRESS INC.*, **1999**, Vol. 4. DOI: 10.1021/ja995774y.
- [32] M. Tosato, M. Asti, M. D. Tiezza, L. Orian, D. Häussinger, R. Vogel, U. Köster, M. Jensen, A. Andrighetto, P. Pastore, V. Di Marco, *Inorg. Chem.* **2020**, 59, 10907–10919. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.4c01405.
- [33] M. Shokeen, C. L. Anderson, *Acc. Chem. Res.* **2009**, 42, 832–841. DOI: 10.1021/ar800255q.
- [34] “The Chemistry of Contrast Agents in Medical Magnetic Resonance Imaging”, A. Merbach, L. Helm, É. Tóth, (eds.), John Wiley & Sons, Ltd, **2013**. DOI: 10.1002/9781118503652.
- [35] P. Caravan, J. J. Ellison, T. J. McMurry, R. B. Lauffer, *Chem. Rev.* **1999**, 99, 2293–2352. DOI: 10.1021/cr980440x.
- [36] M. Naher, C. Su, J. R. Harmer, C. M. Williams, P. V. Bernhardt, *Inorg. Chem.* **2024**, 63, 6453–6464. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.4c00311.
- [37] K.-P. Wang, Z.-H. Jin, H.-S. Shang, C.-D. Lv, Q. Zhang, S. Chen, Z.-Q. Hu, *J. Fluoresc.* **2017**, 27, 629–633. DOI: 10.1007/s10895-016-1991-0.
- [38] A. Majhi, K. Venkateswarlu, P. Sasikumar, *J. Fluoresc.* **2024**, 34, 1453–1483. DOI: 10.1007/s10895-023-03372-3.
- [39] J. Zhang, M.-Y. Chen, C.-B. Bai, R. Qiao, B. Wei, L. Zhang, R.-Q. Li, C.-Q. Qu, *Front. Chem.* **2020**, 8, 800. DOI: 10.3389/fchem.2020.00800.
- [40] “Handbook of Photochemistry” M. Montalti, A. Credi, L. Prodi, M. T. Gandolfi (eds.), 3.^a ed, CRC Press, Boca Raton, **2006**. DOI: 10.1201/9781420015195.
- [41] M. H. Al-Sayah, A. M. Abdalla, M. K. Shehab, *Supramol. Chem.* **2016**, 28, 224–230. DOI: 10.1080/10610278.2015.1091456.
- [42] J. Sanmartín-Matalobos, P. Bermejo-Barrera, I. Pérez-Juste, M. Fondo, A. M. García-Deibe, Y. Alves-Iglesias, *Int. J. Mol. Sci.* **2022**, 23, 11565. DOI: 10.3390/ijms231911565.
- [43] M. P. Lowe, *Inorg. Chim. Acta* **2001**, 317, 163–173. DOI: 10.1016/S0020-1693(01)00346-2.
- [44] S. Zhou, Z.-Q. Zhou, X.-X. Zhao, Y.-H. Xiao, G. Xi, J.-T. Liu, B.-X. Zhao, *Spectrochim. Acta A Mol. Biomol. Spectrosc.* **2015**, 148, 348–354. DOI: 10.1016/j.saa.2015.03.126.
- [45] H. Jiang, Z. Li, Y. Kang, L. Ding, S. Qiao, S. Jia, W. Luo, W. Liu, *Sens. Actuators B: Chem.* **2017**, 242, 112–117. DOI: 10.1016/j.snb.2016.11.033.
- [46] N. Wanichacheva, S. Watpathomsub, V. S. Lee, K. Grudpan, *Molecules* **2010**, 15, 1798–1810. DOI: 10.3390/molecules15031798.
- [47] G. Pedro, F. Duarte, G. M. Dobrikov, A. Kurutos, H. M. Santos, H. J. L. Capelo-Martínez, E. Oliveira, C. Lodeiro, *Dyes Pigm.* **2024**, 224, 112042. DOI: 10.1016/j.dyepig.2024.112042.
- [48] F. Duarte, G. Dobrikov, A. Kurutos, H. M. Santos, J. Fernández-Lodeiro, J. L. Capelo-Martínez, E. Oliveira, C. Lodeiro, *Dyes Pigm.* **2023**, 218, 111428. DOI: 10.1016/j.dyepig.2023.111428.
- [49] G. Pedro, F. Duarte, D. A. Cheptsov, N. Y. Volodin, I. V. Ivanov, H. M. Santos, J. L. Capelo-Martínez, C. Cuerva, E. Oliveira, V. F. Traven, C. Lodeiro, *Sensors* **2023**, 23, 1689. DOI: 10.3390/s23031689.
- [50] Y.-H. Li, L.-M. Chan, L. Tyer, R. T. Moody, C. M. Himel, D. M. Hercules, *J. Am. Chem. Soc.* **1975**, 97, 3118–3126. DOI: 10.1021/ja00844a033.
- [51] C.-L. Li, P.-h. Lu, S.-Y. Lin, A.-T. Wu, *J. Photochem. Photobiol. A Chem.* **2019**, 385, 112088. DOI: 10.1016/j.jphotochem.2019.112088.
- [52] J. B. Chae, D. Yun, H. Lee, H. Lee, K.-T. Kim, C. Kim, *ACS Omega* **2019**, 4, 12537–12543. DOI: 10.1021/acsomega.9b00970.
- [53] F. Duarte, I. Pereira-Gomes, G. M. Dobrikov, J. Galhano, C. S. B. Gomes, A. Kurutos, H. M. Santos, E. Oliveira, M. P. Duarte, J. L. Capelo-Martínez, C. Lodeiro, *Microchem. J.* **2024**, 205, 111237. DOI: 10.1016/j.microc.2024.111237.
- [54] Y. A. Jeong, I. J. Chang, S.-K. Chang, *Sens. Actuators B Chem.* **2016**, 224, 73–80. DOI: 10.1016/j.snb.2015.10.013.
- [55] L. Yang, J. Zhao, J. Wang, G. Han, B. Liu, W. Zhang, Y. Fu, M.-Y. Han, Z. Wang, Z. Zhang, *Talanta* **2020**, 216, 120941. DOI: 10.1016/j.talanta.2020.120941.
- [56] J. Y. Kim, S. Sarkar, K. N. Bobba, P. T. Huynh, A. Bhise, J. Yoo, *Org. Biomol. Chem.* **2019**, 17, 7088–7094. DOI: 10.1039/c9ob00948e.
- [57] T. Koike, T. Watanabe, S. Aoki, E. Kimura, M. Shiro, *J. Am. Chem. Soc.* **1996**, 118, 12696–12703. DOI: 10.1021/ja962527a.
- [58] D. Paderni, D. Lopez, A. Ciavarella, M. Montanari, G. Panza, M. Voccia, M. Formica, B. Canonico, E. Macedi, S. Papa, V. Fusi, *Inorg. Chim. Acta* **2025**, 581, 122620. DOI: 10.1016/j.ica.2025.122620.
- [59] I. Pereira-Gomes, F. Duarte, G. M. Dobrikov, I. Slavchev, A. Kurutos, J. L. Capelo-Martínez, H. M. Santos, C. Lodeiro, *Dyes Pigm.* **2025**, 232, 112461. DOI: 10.1016/j.dyepig.2024.112461.
- [60] B. Branchi, P. Ceroni, G. Bergamini, V. Balzani, M. Maestri, J. van Heyst, S.-K. Lee, F. Luppertz, F. Vögtle, *Chem. Eur. J.* **2006**, 12, 8926–8934. DOI: 10.1002/chem.200601129.

>

Inês Pereira-Gomes

NOVA School of Science and Technology, FCT NOVA, Universidade NOVA de Lisboa. Graduada em Química Aplicada no ano de 2024, atualmente desenvolve a sua tese de mestrado em Química Bioorgânica com foco no desenvolvimento de sensores de fluorescência e nanopartículas, integrando o grupo de investigação BIOSCOPE. A investigação realizada no âmbito da dissertação de mestrado tem como colaboradores internacionais os Professores Atanas

Kurutos e Georgi Dobrikov da Bulgarian Academy of Science, Sofia, Bulgária, e do Professor Clement Cabanetos, do CNRS, Universidade de Angers, França. O seu trabalho visa contribuir para a inovação em métodos de deteção e monitorização, interligando abordagens interdisciplinares para o avanço da química analítica e bioinorgânica. ip.gomes@campus.fct.unl.pt
ORCID.org/0009-0001-6086-8499

Enriquecimento de Muffins com Bagaço de Uva: Composição Nutricional, Fenólica e Capacidade Antioxidante

>
Rui Dias-Costa*
Ana Abraão
Irene Fraga
Irene Gouvinhas
Ana Novo Barros*

Enrichment of Muffins with Grape Pomace: Nutritional Composition, Phenolic Profile, and Antioxidant Capacity. *The use of agri-food by-products, namely grape pomace, as a source of functional ingredients and antioxidants for the development of new products is becoming popular. This by-product is mainly composed of grape skins, seeds and stems. This is the main solid residue of the wine industry, representing around 20 to 25% of the initial quantity of grapes processed and corresponding to around 60% of the original weight of the grapes before the extraction of the must. The aim of this study was to evaluate the influence of incorporating pomace flours from white and red varieties (10 and 20%, respectively) from the Douro Demarcated Region, in muffin formulations, on their nutritional composition, namely fat and crude protein, tryptophan and tyrosine levels, and reducing sugars. Furthermore, the phenolic content and antioxidant capacity were determined. The incorporation of 20% red grape pomace flour proved to be a promising strategy for incorporation into muffins, promoting the valorisation of a by-product of the wine industry. This approach not only contributes to sustainability by reducing waste, but also drives innovation in the development of more nutritious foods with a lower environmental impact.*

O uso de subprodutos agroalimentares, nomeadamente o bagaço de uva, como fonte de ingredientes funcionais e antioxidantes para o desenvolvimento de novos produtos está a tornar-se popular. Este subproduto é composto principalmente por películas, grainhas e engaço de uva. Trata-se do principal resíduo sólido da indústria vinícola, representando cerca de 20 a 25% da quantidade inicial de uvas processadas e correspondendo a cerca de 60% do peso original das uvas antes da extração do mosto. O objetivo deste estudo foi avaliar a influência da incorporação de farinhas de bagaços de variedades brancas e tintas (10 e 20%, respetivamente) provenientes da Região Demarcada do Douro, em formulações de muffins, na sua composição nutricional, nomeadamente gordura e proteína bruta, teores de triptofano e tirosina, e açúcares redutores. Além disso, determinou-se o conteúdo fenólico e a capacidade antioxidante. A incorporação de 20% de farinha de bagaço de uvas tintas revelou ser uma estratégia promissora para incorporação nos muffins, promovendo a valorização de um subproduto da indústria vitivinícola. Esta abordagem não só contribui para a sustentabilidade, reduzindo o desperdício, mas também impulsiona a inovação no desenvolvimento de alimentos mais nutritivos e com menor impacto ambiental.

Introdução

A União Europeia (UE) é líder mundial na produção de vinho, sendo responsável por cerca de 60% da produção. Esta posição de destaque é sustentada pela vasta área de vinha e forte tradição de vinificação. Além disso, a UE é o maior gerador de materiais orgânicos associados

a esta indústria, como engaço de uva, bagaço e borras [1,2]. Em 2023, Portugal destacou-se como o décimo maior produtor de vinho a nível mundial, contribuindo significativamente para a geração destes materiais, que podem ser classificados como desperdícios, resíduos,

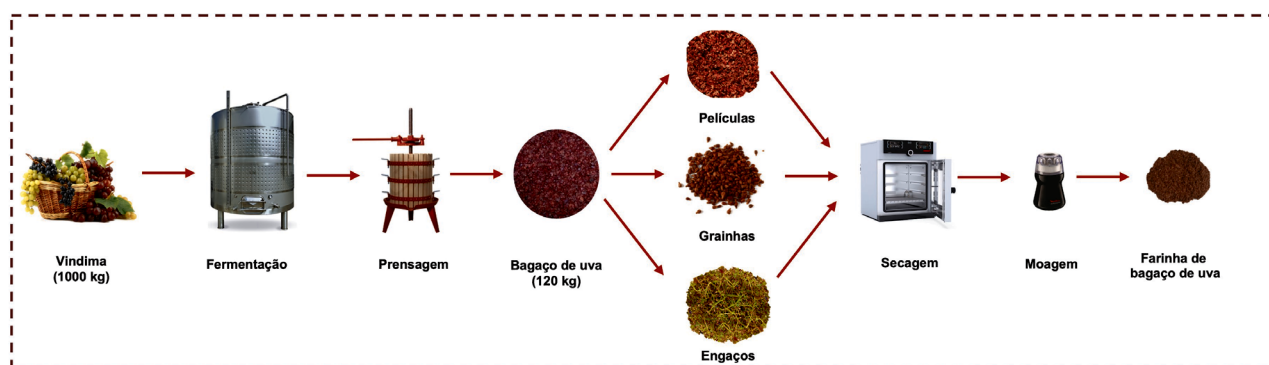


Figura 1 – Representação esquemática da obtenção do bagaço de uva e suas farinhas.

subprodutos e coprodutos do vinho. Entre eles, o bagaço de uva é o subproduto com maior expressão na indústria vitivinícola, correspondendo a aproximadamente 120 kg por cada 1000 kg de uvas colhidas (Figura 1), dando origem a cerca de 9 milhões de toneladas anuais [3-6]. Este subproduto pode ser reciclado, reutilizado, ou reaproveitado dentro de uma abordagem de economia circular, promovendo a sustentabilidade econômica e ambiental da indústria vitivinícola [7,8]. No entanto, a aceitabilidade dos produtos alimentares desenvolvidos com a incorporação deste subproduto é uma limitação significativa para o desenvolvimento industrial causada por fatores pessoais, contextuais ou relacionados ao próprio produto, exigindo estratégias eficazes para atrair a atenção e a confiança dos consumidores [8].

O bagaço de uva é constituído por cerca de 50% de películas, 25% de grainhas e 25% de engaços (Figura 1). A sua composição inclui 50-60% de água, 20-30% de fibra dietética, 5-15% de hidratos de carbono, 8-15% de proteínas, 5-10% de compostos fenólicos, 3-7% de lípidos, 3-6% de ácidos orgânicos e 3-5% de minerais e vitaminas [6,9]. Entre os minerais essenciais presentes destacam-se o ferro, potássio, zinco, cálcio e fósforo nas percentagens de 1,8, 0,1, 0,1, 0,04 e 2,4%, respetivamente. A presença de celulose, hemicelulose, lignina e pectina (43-75%) no bagaço de uva faz deste subproduto uma importante fonte de fibra [10]. Além do referido, o bagaço de uva é uma fonte natural de tocoferóis, compostos reconhecidos pelo seu poder antioxidante [11]. No que diz respeito aos compostos fenólicos, destaca-se a presença de flavonoides, incluindo flavanóis, antocianinas, flavonóis e proantocianidinas, bem como ácidos fenólicos e estilbenos [6,8]. Entre estes compostos, as antocianinas têm despertado particular interesse, uma vez que a Autoridade Europeia para a Segurança Alimentar (EFSA), aprovou a sua utilização como corantes alimentares em bebidas, marmeladas, doces e gelados, de forma a substituir os corantes sintéticos [9].

Estudos recentes têm explorado a adição de extratos e farinha de bagaço de uva a diversos alimentos, incluindo produtos de panificação e confeitaria (como *muffins*, bolachas, pão, *brownies* e biscoitos), massas

e derivados, arroz e cereais, bebidas (como infusões de chá), produtos cárneos, produtos derivados do peixe e produtos lácteos, com o objetivo de melhorar o seu valor nutricional e as suas propriedades bioativas [6,8,10,12]. O incremento em compostos fenólicos neste tipo de produto está associado à melhoria da capacidade antioxidante, preservação de cor, prevenção da oxidação lipídica e inibição do crescimento microbiano. Além disso, a fibra alimentar presente no bagaço de uva contribui para a melhoria da textura e da qualidade sensorial dos alimentos [8,12]. Pesquisas recentes indicam que a incorporação deste subproduto em produtos alimentares pode trazer diversos benefícios à saúde, incluindo o aumento da capacidade antioxidante, a melhoria do perfil de ácidos gordos e o incremento do teor de fibra alimentar, promovendo a saúde intestinal. Além destes benefícios, apresentam uma vasta gama de propriedades biológicas incluindo atividades antialérgica, antidiabética, antimicrobiana, anti-inflamatória, antienvhecimento, antitumoral, antioxidante, antilipotrópica, antitrombótica, além de efeitos cardioprotetores e vasodilatadores [6,8].

Dado o potencial nutricional e funcional deste subproduto, este estudo teve como objetivo avaliar a influência da incorporação de farinha de bagaço de uvas brancas e tintas provenientes da *Região Demarcada do Douro* (sub-regiões Cima Corgo e Douro Superior) na formulação de *muffins*. Para isso, foi analisada a sua composição nutricional, incluindo o teor de gordura bruta, proteína bruta, tirosina, triptofano e açúcares redutores. Foi também determinado o seu conteúdo em fenóis totais e *orto*-difenois, bem como a sua capacidade antioxidante. Um *muffin* controlo, sem adição de farinha de bagaço de uva, também foi preparado e avaliado para comparação.

Metodologias e resultados

Os *muffins* foram formulados de acordo com Bender *et al.* [13], ainda que com ligeiras modificações. A formulação foi constituída por gema de ovo, clara de ovo, leite, fermento em pó, açúcar amarelo, farinha de

trigo, óleo de girassol, farinha de bagaço branco e tinto. Relativamente à farinha de bagaço, a incorporação foi feita por substituição de 10 e 20% da farinha de trigo. O bagaço tinto utilizado para este estudo compreende uma mistura de bagaços de uva (*Vitis vinifera* L.) das castas Touriga Nacional, Touriga Franca e Sousão, enquanto o bagaço branco contém somente a casta Folgasão. Ambos são originários da *Região Demarcada do Douro* (vindima 2021), sendo o bagaço tinto da sub-região Douro Superior e o bagaço branco da sub-região Cima Corgo. Embora a bibliografia mencione que o bagaço contém 25% de engaço, as farinhas de bagaço utilizadas neste estudo são constituídas apenas por películas e grainhas, tendo-se procedido a uma remoção dos vestígios de engaço. As quantidades que foram usadas na formulação dos *muffins* são apresentadas na Tabela 1.

Para avaliar o potencial nutricional dos produtos de confeitaria desenvolvidos foram realizadas diferentes metodologias. Relativamente ao teor de gordura bruta dos *muffins*, a sua determinação foi efetuada pelo método de Extração Assistida por Micro-ondas (MAE) com o equipamento *Milestone ETHOS X Total Fat* [14]. A determinação da proteína bruta foi feita recorrendo a um Analisador Elemental *FlashSmart™* [15]. Já os teores de triptofano e tirosina foram determinados por cromatografia líquida de alta eficiência com deteção por fluorescência (HPLC-FLD) (cromatograma representativo na Figura 2) de acordo com a metodologia descrita por Abraão *et al.* [16]. O conteúdo de açúcares redutores foi determinado pelo método do ácido 3,5-dinitrosalicílico (DNS) descrito por Pinto *et al.* [17]. Todos os resultados referentes à composição nutricional foram expressos em grama por 100 g de peso fresco (pf). Os *muffins* enriquecidos com farinha de bagaço foram estatisticamente comparados com o *muffin* controlo.

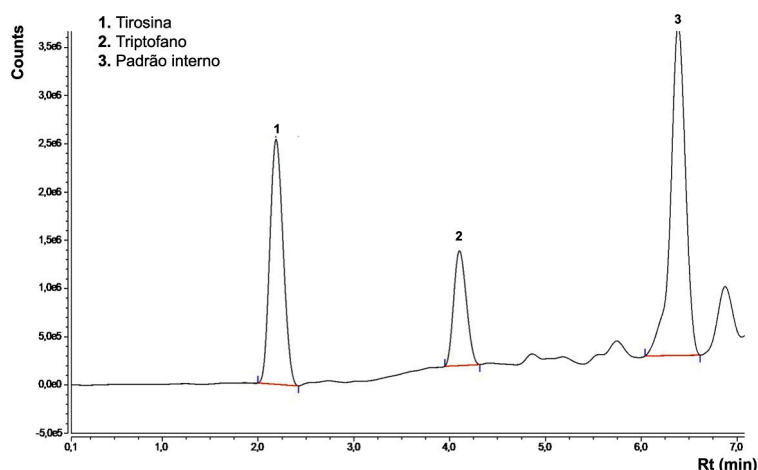


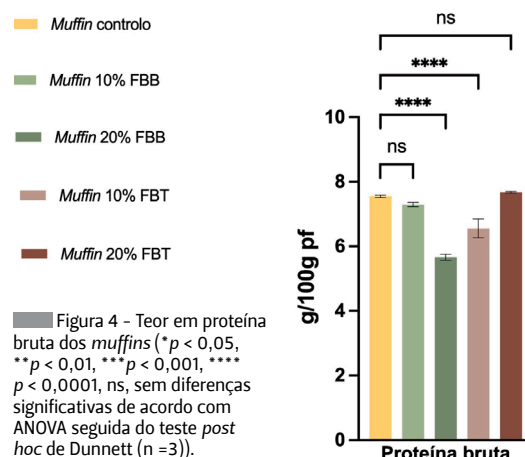
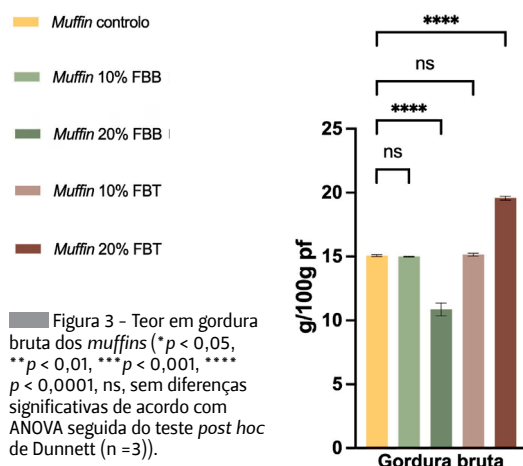
Figura 2 – Cromatograma representativo da quantificação da tirosina e triptofano.

A incorporação de farinhas de bagaço na formulação dos *muffins* foi avaliada para perceber os impactos nas propriedades nutricionais e sensoriais dos mesmos. Relativamente ao teor de gordura bruta, todos os *muffins* enriquecidos com farinha de bagaço apresentaram diferenças significativas em relação ao *muffin* controlo, com exceção do *muffin* enriquecido com 10% de farinha de bagaço branco (FBB) (Figura 3). Em particular, a substituição de 20% da farinha de trigo por farinha de bagaço tinto (FBT) resultou num aumento significativo ($p < 0,001$) no teor de gordura dos *muffins* comparado com o *muffin* controlo. Este aumento pode estar relacionado com o conteúdo lipídico dos bagaços (cerca de 3-7%) [6], que adicionado à receita base do *muffin*, pode ter impacto direto na sua composição nutricional. Apesar de os lípidos desempenharem um papel importante na textura e sabor [18-20], o aumento significativo no teor de gordura pode ser considerado indesejável pelos consumidores que procuram alternativas com menor

Tabela 1 – Formulação dos *muffins* controlo e dos *muffins* enriquecidos com farinha de bagaço de uvas brancas e tintas.

Ingredientes (g/100 g de farinha)	Muffin controlo	Muffin 10% FBB	Muffin 20% FBB	Muffin 10% FBT	Muffin 20% FBT
Farinha de trigo	100	90	80	90	80
Farinha de bagaço branco	-	10	20	-	-
Farinha de bagaço tinto	-	-	-	10	20
Gema de ovo	30	30	30	30	30
Clara de ovo	55	55	55	55	55
Leite	50	50	50	50	50
Açúcar amarelo	80	80	80	80	80
Óleo de girassol	35	35	35	35	35
Fermento em pó	2	2	2	2	2

FBB – farinha de bagaço branco; FBT – farinha de bagaço tinto.



valor calórico e mais saudáveis. Ortega-Heras *et al.* [21] obtiveram resultados semelhantes no seu estudo, no qual verificaram que a incorporação de farinha de bagaço à formulação base levou a um aumento dos teores de gordura, com destaque para o bagaço tinto 20%.

Relativamente ao teor proteico, a adição de farinhas de bagaço, de uma forma geral, não causou um aumento significativo nos muffins enriquecidos em comparação com o muffin controlo (Figura 4), sugerindo que o enriquecimento com farinhas deste subproduto não comprometeu as propriedades nutricionais a este nível.

Relativamente aos teores de triptofano e tirosina, de uma forma geral como pode ser observado na Figura 5, verificou-se um padrão semelhante com a maioria das formulações apresentando uma redução nesses aminoácidos. A única exceção foi a formulação com 20% de FBT, que apresentou um aumento significativo nos teores dos mesmo comparativamente à formulação base. Estes resultados indicam que a adição de FBT na proporção de 20%, pode ser uma estratégia eficaz para enriquecer os muffins com estes aminoácidos, trazendo potenciais benefícios nutricionais. Os conteúdos de tirosina e triptofano foram expressos em mmol por 100 g de peso fresco (pf).

No caso dos açúcares redutores, a adição das farinhas de bagaço influenciou significativamente ($p < 0,001$) os seus conteúdos em comparação com o muffin controlo. O muffin com 20% de FBT apresentou o conteúdo mais elevado, o que sugere que este conferirá maior doçura a estes produtos. Este aumento deve ser cautelosamente considerado na formulação, pois o consumo excessivo de açúcares simples não é benéfico para a saúde [22,23]. Com isto, é aconselhável ajustar ou diminuir a quantidade de açúcar mascavado na receita base, de forma a equilibrar o teor total de açúcares e desta forma tornar o produto final mais saudável.

Para avaliar o conteúdo fenólico dos muffins, procedeu-se à extração dos compostos fenólicos

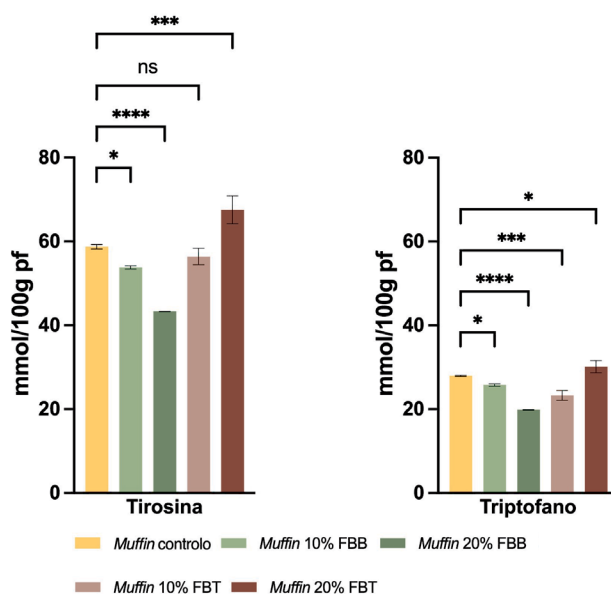
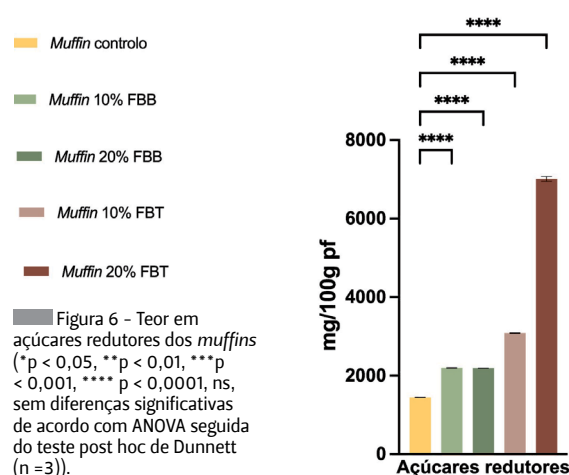


Figura 5 - Concentração em triptofano e tirosina dos muffins (* $p < 0,05$, ** $p < 0,01$, *** $p < 0,001$, **** $p < 0,0001$, ns, sem diferenças significativas de acordo com ANOVA seguida do teste *post hoc* de Dunnett ($n = 3$)).



pelo método de extração sólido-líquido usando uma solução de etanol alimentar: água (50:50, v/v). Em seguida, foi determinado o teor em fenóis totais e orto-difenóis por métodos espectrofotométricos, de acordo com os protocolos descritos por Margraf *et al.* [24] no caso dos fenóis totais e por Dias-Costa *et al.* [25] no caso dos orto-difenóis. Os resultados do conteúdo fenólico foram expressos em mg de equivalentes de ácido gálico por 100 g de peso fresco (pf). Relativamente ao conteúdo em fenóis

Figura 7 - Resultados do conteúdo em fenóis totais e orto-difenóis dos *muffins* (* $p < 0,05$, ** $p < 0,01$, *** $p < 0,001$, **** $p < 0,0001$, ns, sem diferenças significativas de acordo com ANOVA seguida do teste *post hoc* de Dunnett ($n = 3$)).

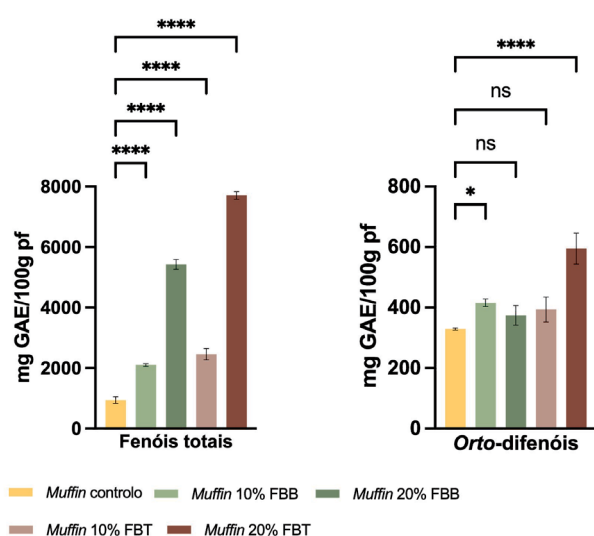
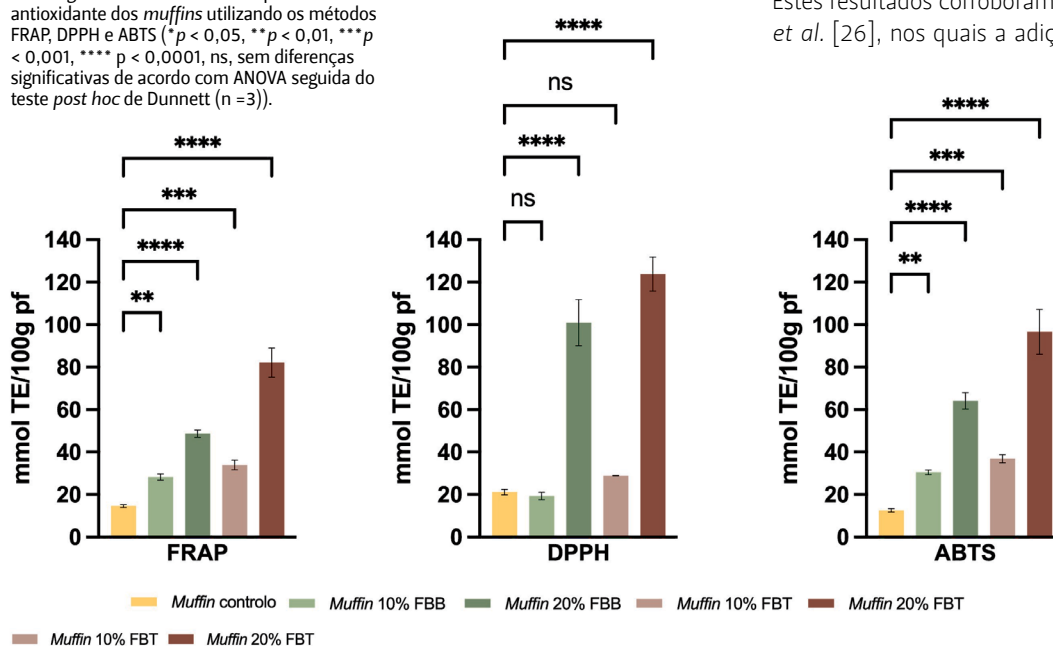


Figura 8 - Resultados da capacidade antioxidante dos *muffins* utilizando os métodos FRAP, DPPH e ABTS (* $p < 0,05$, ** $p < 0,01$, *** $p < 0,001$, **** $p < 0,0001$, ns, sem diferenças significativas de acordo com ANOVA seguida do teste *post hoc* de Dunnett ($n = 3$)).



totais, todos os *muffins* enriquecidos com farinhas de bagaço apresentaram teores significativamente superiores comparativamente ao *muffin* controle ($p < 0,001$) (Figura 7). No caso do teor em orto-difenóis, apenas duas formulações apresentaram diferenças significativas em relação ao controle, uma vez mais com destaque para o *muffin* com incorporação de FBT a 20%, mostrando o aumento mais significativo ($p < 0,001$). Walker *et al.* [26] desenvolveram, de forma semelhante, uma receita de *muffins* com incorporação de 20% de farinha de bagaço, tendo também observado um aumento no conteúdo fenólico.

Em relação à capacidade antioxidante, a sua análise foi feita através de três metodologias diferentes: a capacidade de neutralizar os radicais ABTS⁺ (2,2-azino-bis(3-etilbenzotiazolina-6-sulfonato) de amónio) e DPPH• (2,2-difenil-1-picril-hidrazilo) e pela capacidade da redução do ião Fe³⁺ a Fe²⁺ através do método FRAP (*ferric reducing antioxidant power*) [27]. Os resultados foram expressos em mmol de equivalentes de trolox por 100 g de peso fresco (pf). Como se pode observar na Figura 8, o enriquecimento dos *muffins* com as diferentes percentagens das farinhas de bagaço de castas brancas e tintas, resultou num aumento significativo da capacidade antioxidante dos mesmos comparativamente ao *muffin* controle, à exceção do método DPPH, onde não foram observadas diferenças significativas com a adição de 10% de farinha de bagaço de castas brancas e tintas. Estes resultados indicam que a fortificação com estas farinhas contribuiu para um aumento na concentração de compostos fenólicos, evidenciando o potencial funcional deste subproduto na melhoria do perfil antioxidante dos produtos finais. Estes resultados corroboram os obtidos por Walker *et al.* [26], nos quais a adição de 20% de farinha

de bagaço aos *muffins* resultou num aumento da capacidade antioxidante.

A cor é um dos principais atributos sensoriais que influenciam a aceitação dos alimentos pelos consumidores [28,29]. Para avaliar o impacto da adição de FBB e FBT na coloração dos *muffins*, foram determinados os parâmetros de cor usando um colorímetro (Modelo CR-300, Minolta, Osaka, Japão). O parâmetro L* representa a luminosidade, variando de 0 (preto) a 100 (branco), enquanto o parâmetro a* indica a variação entre tons de verde (-a*) e vermelho (+a*) e o parâmetro b* entre azul (-b*) e amarelo (+b*). Além destes parâmetros referidos anteriormente, foi calculada a diferença total de cor (ΔE) em relação ao *muffin* controlo, utilizando a equação:

onde L1, a1 e b1 correspondem aos valores do *muffin* controlo e L2, a2 e b2 aos valores dos *muffins*

$$\Delta E = \sqrt{(L2 - L1)^2 + (a2 - a1)^2 + (b2 - b1)^2}$$

com farinha de bagaço. A diferença total de cor é geralmente utilizada para descrever a variação de cor, sendo útil para compreender a percepção visual das diferenças entre as formulações testadas [30]. Os valores obtidos para os parâmetros de cor e a diferença total de cor são apresentados na Tabela 2.

Relativamente ao parâmetro L*, o *muffin* controlo apresentou o maior valor, indicando uma cor mais clara, tendo a adição das farinhas de bagaço reduzido significativamente a luminosidade dos *muffins*. A diminuição deste parâmetro foi mais acentuada com o aumento da concentração de farinha, sendo o *muffin* com 20% de FBT o mais escuro (Tabela 2). Em relação ao parâmetro a*, o *muffin* controlo é o que apresenta o valor mais baixo, indicando uma tonalidade menos avermelhada. O maior valor foi observado no *muffin* com 10% FBB, enquanto o *muffin* com 20% FBT teve um valor semelhante não sendo significativamente diferentes. Relativamente ao parâmetro b*, o *muffin* controlo apresentou o maior valor, indicando uma coloração mais amarelada. A adição de FBB e FBT reduziu progressivamente este parâmetro, sendo que o *muffin* com 20% de FBT apresentou a menor intensidade de amarelo. Como expectável, o aumento da percentagem de

incorporação das farinhas de bagaço levou a um consequente aumento do ΔE , evidenciando o impacto da fortificação com estes subprodutos da vinificação na coloração final do produto.

A análise sensorial foi realizada para avaliar a aceitação dos *muffins* enriquecidos por parte dos consumidores. Um total de 26 provadores não treinados participaram na análise sensorial dos cinco *muffins*, tendo avaliado a aparência, cor, aroma, sabor, textura, aceitação geral e intenção de compra, numa escala de 0 a 10 (Figuras 9 e 10). O *muffin* controlo apresentou a maior aceitabilidade e intenção de compra por parte dos provadores, seguido pelo de 20% de bagaço tinto, possivelmente por este último ter tido a melhor classificação de cor, e a segunda maior pontuação em suavidade e doçura. Tal como no presente estudo, os *muffins* controlo desenvolvidos por Ortega-Heras *et al.* [21] e Antonioli *et al.* [31] foram os que obtiveram as maiores pontuações ao nível da aceitação geral por parte dos provadores. Já o *muffin* com 20% de bagaço branco teve a menor aceitação geral e intenção de compra. Em relação ao sabor, o doce foi o mais destacado, sendo mais intenso no *muffin* controlo, seguido pelo de 20% de bagaço tinto, apesar de, contraditoriamente, o *muffin* 20% com FBT ter apresentado o maior teor em açúcares totais. A menor percepção de doçura no *muffin* com 20% de FBT pode ser atribuída a modificações na matriz alimentar, interferência de fibras na libertação de açúcares, possíveis interações com compostos fenólicos e alteração do perfil sensorial global. Esses fatores combinados demonstram que a percepção do sabor doce não é determinada apenas pelo teor absoluto de açúcares, mas por uma interação complexa de variáveis físico-químicas e sensoriais [32-35]. O menor nível de doçura foi observado no *muffin* com 10% de FBB (Figura 10). Estes resultados sugerem que a formulação tradicional sem adição de farinha de bagaço é a mais apreciada pelos consumidores, principalmente devido à sua suavidade, doçura, cheiro e homogeneidade dos poros do miolo como é possível observar na Figura 10. Apesar da formulação base ter sido a mais apreciada, o *muffin* com 20% de FBT demonstrou

Tabela 2 – Resultados dos parâmetros de cor L*, a*, b* e diferença total de cor (ΔE) dos *muffins* produzidos.

Parâmetros de cor	<i>Muffin</i> controlo	<i>Muffin</i> 10% FBB	<i>Muffin</i> 20% FBB	<i>Muffin</i> 10% FBT	<i>Muffin</i> 20% FBT
L*	76 ± 1,0 ^a	49,7 ± 0,5 ^b	50 ± 1,0 ^b	46 ± 1,0 ^c	34,2 ± 0,9 ^d
a*	1,0 ± 0,9 ^c	6,8 ± 0,4 ^a	5,8 ± 0,5 ^a	4,1 ± 0,3 ^b	6,30 ± 0,07 ^a
b*	30,5 ± 0,5 ^a	26,1 ± 0,6 ^b	20 ± 1,0 ^c	17,3 ± 0,2 ^d	9,1 ± 0,2 ^e
ΔE	-	27,4 ± 0,2 ^d	28,6 ± 0,3 ^c	33,0 ± 0,2 ^b	47,1 ± 0,2 ^a

Os valores são apresentados com média ± desvio padrão (n = 3). Foi realizada uma análise de variância (ANOVA), seguida pelo teste *post hoc* de Tukey. Letras diferentes correspondem a diferenças significativas entre cada variedade (p < 0,05).

um potencial promissor, destacando-se como a segunda opção em aceitabilidade geral e intenção de compra. Estes resultados sugerem que a adição de 20% de FBT, pode ser uma alternativa viável para enriquecer a formulação base. No entanto, são necessários ajustes para melhorar ainda mais as suas características sensoriais.

Conclusões

Embora a fortificação com farinha de bagaço de uva tenha promovido melhorias nutricionais e funcionais, ajustes na formulação podem ser necessários para otimizar o equilíbrio entre o perfil sensorial e os benefícios nutricionais. Dado o aumento dos açúcares redutores e da gordura bruta em algumas formulações, uma abordagem pertinente seria reduzir a quantidade de açúcar e gordura na formulação base, aproveitando os açúcares naturalmente presentes e os lípidos provenientes do bagaço. Essas modificações podem contribuir para um produto mais equilibrado, mantendo ou potencializando as propriedades antioxidantes e nutricionais sem comprometer a aceitação do consumidor. Estes resultados sugerem que a adição de 20% de FBT em relação ao peso total de farinha, pode ser uma estratégia viável para o desenvolvimento de produtos com maior valor nutricional e potencial funcional por terem apresentado os maiores teores de nutrientes, compostos fenólicos e capacidade antioxidante. No entanto, a determinação do teor de fibra dietética, do tempo de vida útil, da oxidação lipídica e análises de textura serão importantes para perceber melhor o impacto da adição do bagaço de uva nestes produtos de pastelaria. Além de reduzir o desperdício e contribuir para a sustentabilidade, esta abordagem impulsiona a inovação na criação de alimentos mais nutritivos e com menor impacto ambiental.

Agradecimentos

Este trabalho é financiado por fundos nacionais da FCT – Fundação para a Ciência e a Tecnologia, através dos projetos UID/04033: Centro de Investigação e de Tecnologias Agro-Ambientais e Biológicas e LA/P/0126/2020 (DOI: 10.54499/LA/P/0126/2020). Rui Dias-Costa agradece o apoio financeiro fornecido pela Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT) (bolsa de doutoramento: 2021.07571.BD). Irene Gouveias agradece à FCT pelo financiamento através do Estímulo ao Emprego Científico—Call Individual (2022.00498.CEECIND), DOI: 10.54499/2022.00498.CEECIND/CP1749/CT0001 (consultado em 12/02/2025). Os autores também agradecem à Rozès por fornecerem as amostras de bagaço de uva.

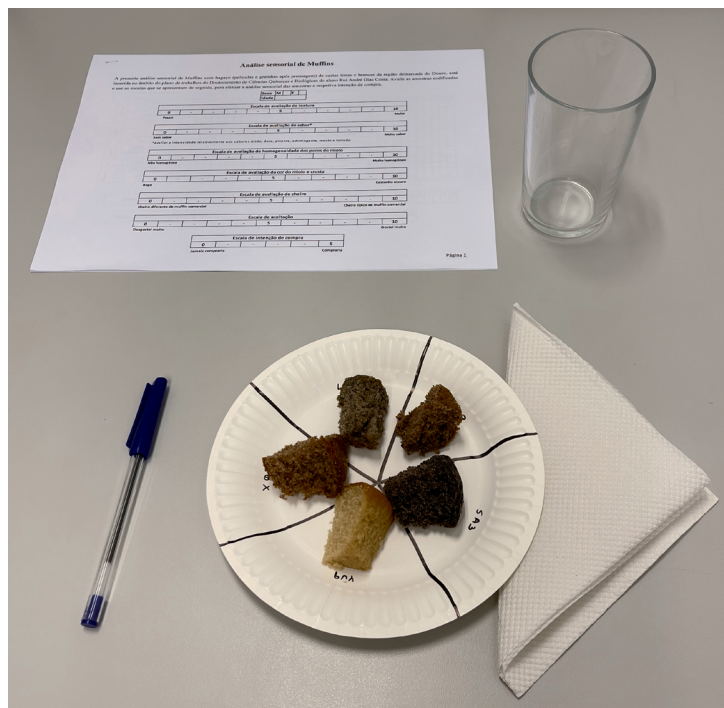


Figura 9 – Análise sensorial dos muffins.

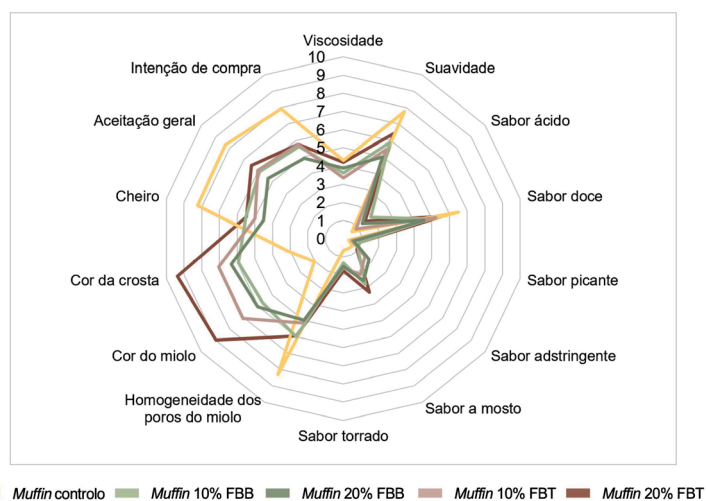


Figura 10 – Resultados da análise sensorial dos muffins.

Referências

- [1] P. Tapia-Quirós, M. F. Montenegro-Landívar, M. Reig, X. Vecino, J. L. Cortina, J. Saurina, M. Granados, *Foods* **2022**, *11*, 362. DOI: 10.3390/foods11030362.
- [2] P. Corsinovi, D. Gaeta, *The European Wine Policies: Regulations and Strategies*, in "The Palgrave Handbook of Wine Industry Economics", Springer International Publishing: Cham, **2019**, 265-290.
- [3] OIV State of the World Vine and Wine Sector 2023. *International Organisation of Vine and Wine Intergovernmental Organisation* **2024**, 10.
- [4] OIV Statistics Database: oiv.int/what-we-do/statistics (acedido a 05/09/2023).
- [5] R. P. Rodrigues, L. M. Gando-Ferreira, M. J. Quina, *Molecules* **2022**, *27*, 4709. DOI: 10.3390/molecules27154709.
- [6] A. Karastergiou, A. L. Gancel, M. Jourdes, P. L. Teissedre, *Antioxidants* **2024**, *13*, 1131. DOI: 10.3390/antiox13091131.
- [7] A. De Iseppi, G. Lomolino, M. Marangon, A. Curioni, *Food Res. Int.* **2020**, *137*, 109352. DOI: 10.1016/j.foodres.2020.109352.
- [8] C. Wang, Y. You, W. Huang, J. Zhan, *Food Chem. X* **2024**, *24*, 101845. DOI: 10.1016/j.fochx.2024.101845.
- [9] J. Da, C. Lopes, J. Madureira, F. M. A. Margaça, S. C. Verde, *Molecules* **2025**, *30*, 362. DOI: 10.3390/molecules30020362.
- [10] O. E. Constantin, F. Stoica, R. N. Rațu, N. Stănciuc, G. E. Băhrim, G. Răpeanu, *Antioxidants* **2024**, *13*, 100. DOI: 10.3390/antiox13010100.
- [11] T. Golosvili, M. Akhalkatsi, G. Badridze, Z. Kikvidze, *Cell. Mol. Biol.* **2021**, *67*, 112-115. DOI: 10.14715/cmb/2021.67.1.17.
- [12] B. AntoniĆ, S. Janciková, D. Dani, T. Bohuslava, *Foods* **2020**, *9*, 1-20. DOI: 10.3390/foods911627.
- [13] A. B. B. Bender, C. S. Speroni, P. R. Salvador, B. B. Loureiro, N. M. Lovatto, F. R. Goulart, M. T. Lovatto, M. Z. Miranda, L. P. Silva, N. G. Penna, *J. Culin. Sci. Technol.* **2017**, *15*, 143-157. DOI: 10.1080/15428052.2016.1225535.
- [14] J. G. Lourenço, D. Ettlin, I. C. Cardoso, J. M. Rodilla, *Foods* **2021**, *10*, 2364. DOI: 10.3390/foods10102364.
- [15] K. D. A. Pedersen, L. T. Andersen, M. Heiselberg, C. A. Brigsted, F. L. Støvring, L. M. Mikkelsen, S. A. Hansen, C. E. Rusbjerg-Weberskov, M. Lübeck, S. G. Echers, *Proteomes* **2025**, *13*, 8. DOI: 10.3390/proteomes13010008.
- [16] A. Abraão, M. Yu, I. Gouvinhas, L. Ferreira, A. M. Silva, R. Domínguez-Perles, A. Barros, *Foods* **2023**, *12*, 973. DOI: 10.3390/foods12050973.
- [17] P. A. Pinto, R. M. F. Bezerra, I. Fraga, C. Amaral, A. Sampaio, A. A. Dias, *Int. J. Environ. Res. Public Health* **2020**, *19*, 2572. DOI: 10.3390/ijerph17165900.
- [18] F. Shahidi, A. Hossain, *Molecules* **2022**, *27*, 5014. DOI: 10.3390/molecules27155014.
- [19] C. J. Field, L. Robinson, *Adv. Nutr.* **2019**, *10*, 722-724. DOI: 10.1093/advances/nmz052.
- [20] T. Nishimura, *J. Lipid Nutrition* **2021**, *30*, 14-25. DOI: 10.4010/jln.30.14.
- [21] M. Ortega-Heras, I. Gómez, S. de Pablos-Alcalde, M. L. González-Sanjósé, *Foods* **2019**, *8*, 419. DOI: 10.3390/foods8090419.
- [22] K. M. Gillespie, E. Kemps, M. J. White, S. E. Bartlett, *Nutrients* **2023**, *15*, 889. DOI: https://doi.org/10.3390/nu15040889.
- [23] Y. H. Alam, R. Kim, C. J. Jang, *Lipid Atheroscler.* **2022**, *11*, 20. DOI: 10.12997/jla.2022.11.1.20.
- [24] T. Margraf, A. R. Karnopp, N. D. Rosso, D. Granato, *J. Food Sci.* **2015**, *80*, C2397-C2403. DOI: 10.1111/1750-3841.13077.
- [25] R. Dias-Costa, C. Medrano-Padial, R. Fernandes, R. Domínguez-Perles, I. Gouvinhas, A. N. Barros, *Molecules* **2024**, *29*, 5437. DOI: 10.3390/molecules29225437.
- [26] R. Walker, A. Tseng, G. Cavender, A. Ross, Y. Zhao, *J. Food. Sci.* **2014**, *79*, S1811-S1822. DOI: 10.1111/1750-3841.12554.
- [27] R. D. Costa, R. Domínguez-Perles, A. Abraão, V. Gomes, I. Gouvinhas, A. N. Barros, *Molecules* **2023**, *28*, 6660. DOI: 10.3390/molecules28186660.
- [28] M. Kardaś, M. Rakula, A. Kołodziejczyk, W. Staśkiewicz-Bartecka, *Foods* **2024**, *13*, 4059. DOI: 10.3390/foods13244059.
- [29] F. M. Clydesdale, *Crit. Rev. Food Sci. Nutr.* **1993**, *33*, 83-101. DOI: 10.1080/10408399309527614.
- [30] R. Tolve, B. Simonato, G. Rainero, F. Bianchi, C. Rizzi, M. Cervini, G. Giuberti, *Foods* **2021**, *10*, 75. DOI: 10.3390/foods10010075.
- [31] A. Antonioli, L. Becerra, P. Piccoli, A. Fontana, *Plants* **2024**, *13*, 590. DOI: 10.3390/plants13050590.
- [32] A. C. Mosca, F. van de Velde, J. H. F. Bult, M. A. J. S. van Boekel, M. Stieger, *LWT - Food Science and Technology* **2012**, *46*, 183-188. DOI: 10.1016/j.lwt.2011.10.009.
- [33] R. S. J. Keast, P. A. S. Breslin, *Food Qual. Prefer.* **2003**, *14*, 111-124. DOI: 10.1016/S0950-3293(02)00110-6.
- [34] A. Drewnowski, C. Gomez-Careros, *Am. J. Clin. Nutr.* **2000**, *72*, 1424-1435. DOI: 10.1093/ajcn/72.6.1424.
- [35] D. P. Bolhuis, C. G. Forde, *Trends Food. Sci. Technol.* **2020**, *106*, 445-456. DOI: 10.1016/j.tifs.2020.10.021.

>

Ana Abraão

Centro de Investigação e Tecnologias Agroambientais e Biológicas (CITAB), Inov4Agro, Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro.

É Investigadora do CITAB/Inov4Agro. Desenvolve o seu trabalho de investigação no âmbito do projeto VIIAFOOD, com enfoque nos desperdícios gerados na produção de sumos de fruta. aabraao@utad.pt

ORCID.org/0000-0002-1404-5715

>

*Ana Novo Barros

Centro de Investigação e Tecnologias Agroambientais e Biológicas (CITAB), Inov4Agro, Universidade de

Trás-os-Montes e Alto Douro.

É Professora Associada com Agregação do Departamento de Química da Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro (UTAD). É coordenadora do projeto europeu Wasteless e responsável pelo Laboratório de Fitoquímicos do CITAB. Desenvolve o seu trabalho de investigação na área da valorização de subprodutos da indústria agroalimentar. abarros@utad.pt

ORCID.org/0000-0001-5834-6141

>

Irene Fraga

Centro de Investigação e Tecnologias Agroambientais e Biológicas

(CITAB), Inov4Agro, Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro.

É Técnica Superior na UTAD, sendo responsável técnica pelo laboratório de Bioquímica e Nutrição Humana. ifraga@utad.pt

ORCID.org/0000-0001-5481-8770

>

Irene Gouvinhas

Centro de Investigação e Tecnologias Agroambientais e Biológicas (CITAB), Inov4Agro, Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro.

É Investigadora Auxiliar do CITAB/Inov4Agro e desenvolve o seu trabalho de investigação na área da química

alimentar e valorização de subprodutos da indústria agroalimentar.

igouvinhas@utad.pt

ORCID.org/0000-0002-0575-4958

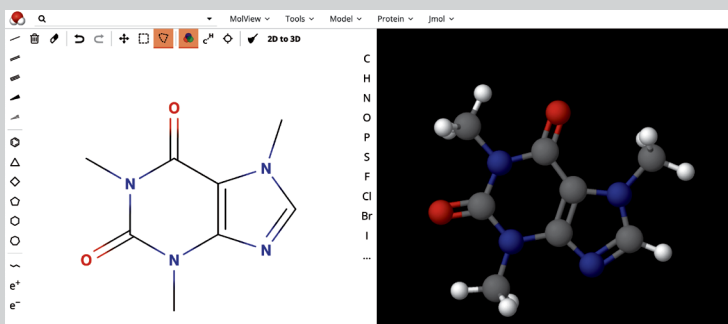
>

*Rui Dias-Costa

Centro de Investigação e Tecnologias Agroambientais e Biológicas (CITAB), Inov4Agro, Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro.

É aluno de Doutoramento em Ciências Químicas e Biológicas da UTAD. O seu doutoramento incide sobre a valorização de subprodutos do vinho. ruiacosta@utad.pt

ORCID.org/0000-0003-4681-9276



Estrutura química da cafeína: @ MolView.

Veja mais em molview.org

>

Vasco Bonifácio

vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt

Gira as Moléculas

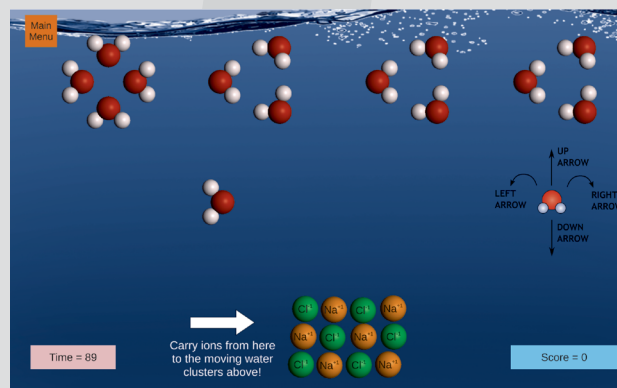
O MolView é um site gratuito e interativo que coloca a visualização molecular ao alcance de todos. Através de uma interface muito simples, é possível desenhar moléculas, gerar automaticamente a sua estrutura em 3D e rodá-las em todas as direções, permitindo observar a geometria com grande detalhe. Além disso, o MolView está ligado a bases de dados internacionais, como a PubChem e a Crystallography Open Database, o que permite pesquisar compostos reais, visualizar cristais e até obter informações sobre propriedades químicas e espectros. Para estudantes e professores, é uma boa ferramenta para apoiar o ensino, tornando conceitos abstratos – como ligações químicas, hibridação ou conformação – mais fáceis de entender. Para os curiosos, é uma forma fascinante de entrar no mundo invisível das moléculas e perceber como a estrutura influencia as propriedades da matéria. Tudo isto diretamente no navegador, sem precisar de instalar programas!

Vamos Jogar?

O InteractiveChemistry é uma plataforma online gratuita que leva a química para fora dos manuais e a coloca literalmente “em jogo”. Em vez de estudar conceitos de forma abstrata, aqui é possível aprender química a brincar: através de simulações, jogos e desafios interativos, o utilizador experimenta, descobre e percebe a ciência que está por trás das reações, das ligações e dos cálculos químicos. Criado originalmente por professores e estudantes norte-americanos, este site tem como objetivo aproximar a química do dia-a-dia, mostrando que é possível aprender ciência de forma envolvente. Os conteúdos estão organizados em pequenos módulos e atividades, cobrindo temas como ligações covalentes e iónicas, comportamento ácido-base, estequiometria, equilíbrio químico, gases e muito mais. Tudo acontece diretamente no navegador, sem necessidade de instalação, e funciona tanto em computadores como em tablets. Cada jogo funciona como um minilaboratório virtual, onde se pode manipular variáveis, testar hipóteses e ver resultados em tempo real. Este ambiente é ideal para quem gosta de aprender fazendo, e torna-se uma excelente ferramenta para professores que queiram dinamizar aulas ou criar desafios para os alunos. O InteractiveChemistry prova que a química não tem de ser complicada nem

IC2020 Games

Built by Laguna Beach High School



O herói da solvatação: @ InteractiveChemistry.

aborrecida – pode ser uma experiência prática, criativa e divertida. Basta um clique para começar a jogar... e perceber que, afinal, aprender ciência pode ser muito mais interativo do que pensávamos!

Veja mais em interactivechemistry.org

>

Vasco Bonifácio

vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt

Não se Esqueçam do Protetor Solar!

No verão, o protetor solar é um companheiro fiel de todos os que gostam de atividades ao ar livre. Nas outras estações do ano, apesar da intensidade do calor diminuir, deveria também acompanhar-nos.

Dos três tipos de radiação UV (UVC, UVB e UVA) a camada de ozônio absorve 100% dos raios UVC, 90% dos raios UVB e apenas uma quantidade mínima dos raios UVA. Estes últimos estão associados ao envelhecimento, à pigmentação, ao aumento do número de células inflamatórias na derme e à diminuição do número de células apresentadoras de antígenos. Já os raios UVB causam queimaduras solares e cânceres de pele. Podemos proteger-nos da radiação solar utilizando roupa, chapéus e óculos de sol como barreiras físicas, mas para proteger a nossa pele quando não está coberta, é necessário o protetor solar.

A *Food and Drug Administration* (FDA) classifica o protetor solar como um medicamento de venda livre. Atualmente, 16 filtros UV estão aprovados (14 filtros orgânicos e dois filtros inorgânicos).

O mecanismo de ação de um protetor solar físico baseia-se na reflexão e dispersão da luz UV, utilizando para isso compostos químicos como o dióxido de titânio ou o óxido de zinco. As propriedades refletivas, para as quais contribuem, entre outros, o índice de refração, o tamanho das partículas e a espessura da película, determinam a eficácia destes protetores solares.

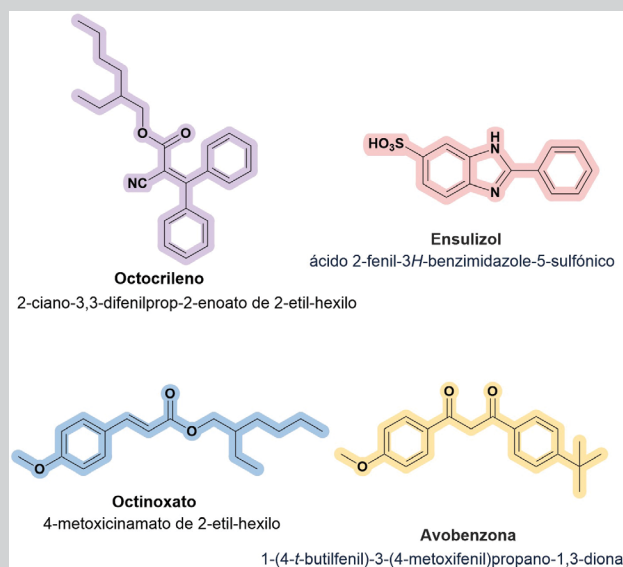
Os protetores solares químicos são conhecidos como protetores solares orgânicos. O composto orgânico absorve os raios UV de elevada energia passando a um estado excitado. À medida que retorna ao estado fundamental liberta energia na forma de calor ou de radiação de maiores comprimentos de onda e, portanto, de menor energia. Os protetores solares de amplo espectro absorvem a radiação UVA e UVB. Os filtros UVB absorvem todo o espectro da radiação UVB (290–320 nm) causadores de queimaduras solares, danos ao ADN e cancro de pele. Entre eles encontram-se aminobenzoatos, cinamatos, salicilatos, octocrileno, ensulizol e derivados da cânfora. O uso de aminobenzoatos diminuiu devido à sensibilidade ao ácido *para*-aminobenzoico (PABA). O PABA é um filtro UVB muito eficaz; no entanto, é foto-alérgeno e alérgeno de contacto. Os cinamatos, incluindo o octinoxato (OMC) e o cinoxato, substituíram o PABA como o segundo absorvente de UVB mais potente. Os salicilatos são usados em altas concentrações, pois têm pouca capacidade de absorção no UVB. O octocrileno é um produto químico mais seguro, associado a uma

menor probabilidade de irritação, fototoxicidade e potencial foto-alérgico. Quando combinado com outros, pode aumentar o fator de proteção solar (FPS; número de vezes que o protetor solar aumenta a proteção natural da pele contra as queimaduras solares).

Exemplos de filtros de UVA são: benzofenonas, antranilatos, avobenzona e o ecamsule. As benzofenonas típicas absorvem principalmente os raios UVB; no entanto, a oxibenzona, a benzofenona mais comumente usada, é considerada um absorvente de amplo espectro tal como a avobenzona e o butilmetoxidibenzoilmetano, que têm alta eficácia contra os raios UVA I (> 380 nm); no entanto, é foto-instável e perde de 50 a 90% de eficácia após 1 h de exposição aos raios UV. Pode ser combinada com octocrileno, benzofenonas e óxido de zinco ou dióxido de titânio, entre outros, para aumentar a foto-estabilidade. O ecamsule contém ácido tereftalilideno dicarboxilato, um produto foto-estável resistente à água com baixa absorção sistêmica. Os protetores solares de amplo espectro incluem metileno bis-benzotriazolil tetrametilbutilfenol (MBBT) e bis-etil-hexiloxifenol metoxifenil triazina (BEMT).

O protetor solar deve ser aplicado topicamente. Uma camada generosa e uniforme deve ser aplicada pelo menos 15 min antes da exposição ao sol, devendo ser replicada a cada 2 h e após transpirar ou nadar para manter a proteção.

Já sabe, no verão ou no inverno proteja-se da exposição solar. Use protetor solar, que está cheio de boa química!



Saiba mais em:

Treasure Island (FL): StatPearls Publishing; ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK537164 (acedido em 29/08/2025).

>

Marta Piñeiro

mpineiro@qui.uc.pt

Slime Mágico: Polímeros em Ação!

>
Marta C. Corvo

Introdução

Já alguma vez quiseste brincar com algo que não é bem sólido nem líquido? O *slime* é uma massa elástica e divertida que podes esticar, apertar e moldar! Será que conseguimos produzir *slime* a partir de ingredientes que temos em casa? Nesta atividade, vamos descobrir como se forma o *slime* - e perceber que estamos a brincar com polímeros, materiais que usamos todos os dias.



Material

- 40 mL de cola branca escolar (à base de polímeros vinílicos, como o poli(acetato de vinilo));
- ½ colher de chá de bicarbonato de sódio;
- 40 mL de espuma de barbear;
- Solução para lentes de contacto (que contenha ácido bórico e/ou borato);
- Corante alimentar (opcional);
- Recipiente e colher para misturar;
- Colheres de medida.

Procedimento:

1.

Colocar a cola branca num recipiente.



2.

Adicionar o bicarbonato de sódio e misturar bem.

3.

Acrescentar algumas gotas de corante alimentar (opcional).



4.

Adicionar 40 mL de espuma de barbear e continuar a mexer.



5.

Juntar a solução de lentes de contacto, adicionando seis gotas de cada vez, aos poucos, continuando sempre a mexer.



Explicação

A cola branca é feita de longas cadeias chamadas polímeros. Normalmente, essas cadeias estão soltas, e por isso a cola tem aspeto líquido e fluido. A cola branca é feita à base de poli(acetato de vinilo) (PVAc), um polímero que dá adesividade. Algumas colas também contêm poli(vinil álcool) (PVA), que possui grupos -OH capazes de reagir com o borato. Essa composição pode variar, e por isso nem todas as colas funcionam igualmente bem. O bicarbonato de sódio aumenta o pH da mistura, tornando o meio mais básico. Só assim o ácido bórico, presente na solução de lentes de contacto, se transforma no ião borato, que pode formar pontes entre as cadeias de PVA. Quando isso acontece, forma-se uma rede tridimensional de polímeros – um processo chamado reticulação. O resultado é uma massa elástica e viscosa, o famoso *slime*! Sabias que o *slime* é um fluido não newtoniano? Isso quer dizer que ele se comporta de forma diferente quando o mexemos devagar ou muito depressa!

6.

A mistura vai começar a ganhar consistência e elasticidade. Continuar a mexer até deixar de colar nas paredes do recipiente.



7.

Retirar do recipiente e continuar a amassar até que não cole nas mãos. O *slime* mágico está pronto!



Bibliografia

- [1] Adaptado de *Science Buddies*: "How to Make Slime", sciencebuddies.org/stem-activities/how-to-make-slime (consultado em 25/07/2025).

>

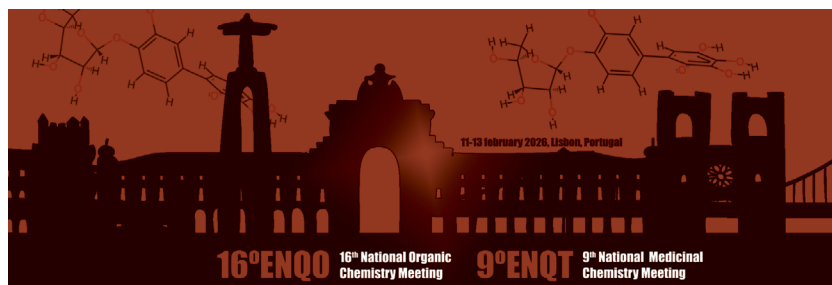
Marta C. Corvo

*Faculdade de Ciências e Tecnologia,
Universidade Nova de Lisboa.
i3N/CENIMAT.*

Marta Corvo é investigadora no i3N-CENIMAT, Dep. Ciência dos Materiais da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade NOVA de Lisboa, dedicada à

ressonância magnética nuclear. Além da divulgação de ciência, interessa-se pelo desenvolvimento de novos materiais para captura de CO₂, armazenamento de energia e preservação de obras de arte. marta.corvo@fct.unl.pt
ORCID.org/0000-0003-0890-6133

16.º Encontro Nacional de Química Orgânica (ENQO) e 9.º Encontro Nacional de Química Medicinal



Mais informações disponíveis em: 16enqo-9enqm.events.chemistry.pt

De **11 a 13 de fevereiro de 2026**, a Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa será palco do 16.º Encontro Nacional de Química Orgânica (ENQO) e do 9.º Encontro Nacional de Química Medicinal, dois eventos científicos promovidos pela Sociedade Portuguesa de Química (SPQ). Estes Encontros reunirão investigadores, estudantes e profissionais de diversas áreas da Química, com especial enfoque na Química Orgânica, Medicinal

e Biológica. O programa pretende fomentar a partilha de conhecimento, a discussão científica de alto nível e a criação de redes de colaboração entre participantes de diferentes instituições e setores. A organização sublinha a ambição de proporcionar um ambiente dinâmico, estimulante e inspirador, onde será possível celebrar e divulgar ciência de excelência desenvolvida em Portugal e além-fronteiras.

Eurachem/CITAC Workshop: Accreditation of Chemical Tests – Technical Challenges

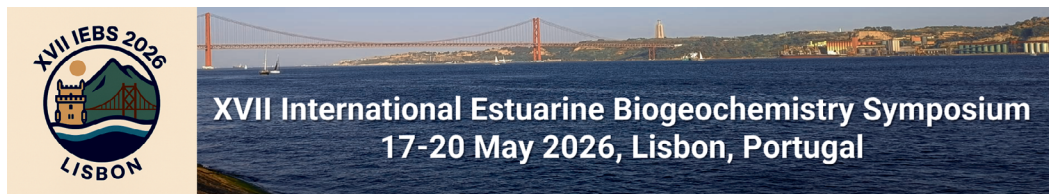


Mais informações disponíveis em: eurachem2026.events.chemistry.pt

A Eurachem (*European Network of Analytical Chemistry*) e a CITAC (*Cooperation on International Traceability in Analytical Chemistry*) convidam todos os profissionais e investigadores da área da Química Analítica interessados na avaliação da incerteza de medição e na interpretação de resultados a participar na **Eurachem Week 2026**, que decorre de **11 a 12 de maio de 2026**. No primeiro dia tem lugar uma ação de formação dedicada ao tema “*Evaluation of the measurement uncertainty from in-house precision and recovery data*”, focada em estratégias práticas para estimar a incerteza com base em dados internos de precisão e recuperação. Segue-se, nos dias 11 e 12 de maio, um *workshop* internacional subordinado ao

tema “*Quality in Analytical Measurements: Uncertainty Evaluation and Results Interpretation*”, aberto a todos os interessados. O programa inclui apresentações e discussões sobre boas práticas na avaliação da qualidade dos resultados analíticos, com foco em aplicações laboratoriais e regulamentares. Nos dias seguintes terão lugar as reuniões dos Grupos de Trabalho da Eurachem (13 de maio) e a Assembleia Geral da Eurachem (14 e 15 de maio), que reunirá os seus delegados nacionais e membros do Comité Executivo. A Semana Eurachem 2026 afirma-se, assim, como um ponto de encontro europeu para a reflexão técnica e científica sobre a qualidade e fiabilidade na medição química.

XVII International Estuarine Biogeochemistry Symposium (IEBS 2026)



Mais informações disponíveis em: iebs2026.events.chemistry.pt

Entre **17 e 20 de maio de 2026**, Lisboa será palco do *XVII International Estuarine Biogeochemistry Symposium* (IEBS 2026), sob o lema “*Bridging Current Challenges and Missing Gaps in Estuarine Biogeochemistry*”. Este simpósio internacional reunirá investigadores de referência e jovens cientistas de múltiplas áreas, num ambiente multidisciplinar e colaborativo, dedicado à discussão dos desafios emergentes na biogeoquímica de estuários e zonas costeiras. O simpósio abordará uma ampla gama de tópicos, incluindo: identificação de fontes e comportamento de contaminantes, emissões de gases com efeito de estufa, desenvolvimento e

aplicação de técnicas analíticas avançadas, modelação integrada de processos biogeoquímicos, impactos das alterações globais, e interações entre biodiversidade, funcionamento dos ecossistemas e serviços ambientais. O IEBS 2026 valoriza uma perspetiva verdadeira-mente interdisciplinar, promovendo a participação de químicos, biólogos, toxicologistas, ecologistas, geólogos, modeladores, físicos e cientistas sociais. Pretende-se construir uma visão integrada e inovadora da biogeoquímica estuarina e costeira, com impacto tanto na compreensão científica como na gestão sustentável e nas políticas ambientais.

20th International Conference on Electroanalysis (ESEAC 2026)



Mais informações disponíveis em: eseac2026.events.chemistry.pt

A Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa será palco, de **7 a 11 de junho de 2026**, da *20th International Conference on Electroanalysis* (ESEAC 2026). Este Encontro bienal reúne especialistas europeus e de outras partes do mundo dedicados à química eletroanalítica, com o objetivo de fomentar o *networking* internacional, partilhar descobertas recentes e debater os desafios atuais na área. A ESEAC teve início em 1986, com o

primeiro congresso organizado pelo Professor Malcolm R. Smyth, e desde então tem sido realizada em várias cidades europeias. Lisboa junta-se a essa lista histórica como anfitriã da edição de 2026. Além das sessões de apresentação de trabalhos científicos, a conferência promete também momentos de debate, cooperação e partilha de ideias, com participação de investigadores, académicos e profissionais ligados à eletroquímica.

Agenda

(por razões alheias ao *Química*, alguns dos eventos poderão sofrer ajustes de calendarização)

> novembro de 2025

01 - 10 de novembro de 2025, Berlim, Alemanha
10th Berlin Science Week
berlinscienceweek.com

07 - 09 de novembro de 2025, Berlim, Alemanha
Falling Walls Science Summit 2025
falling-walls.com/science-summit

10 - 12 de novembro de 2025, Braga, Portugal
XXIX Encontro Luso-Galego de Química
xxixelgq.events.chemistry.pt/pt

12 - 13 de novembro de 2025, Londres, Reino Unido
4th Wood Mackenzie's Hydrogen Conference
woodmac.com/events/hydrogen-conference

14 - 28 de novembro de 2025, *online*
29th International Electronic Conference on
Synthetic Organic Chemistry (ECSOC-29)
sciforum.net/event/ecsoc-29

17 - 19 de novembro de 2025, Tarragona, Espanha
Spain Netherlands Organic
Chemistry Symposium – SNOCS
snocs2025.com

dezembro de 2025

02 - 03 de dezembro de 2025,
Eindhoven, Países Baixos
ChAlnS 2025
nwochains.nl

04 - 06 de dezembro de 2025, Funchal, Portugal
14.º Encontro Nacional de
Cromatografia – 14.º ENC 2025
14enc.events.chemistry.pt

07 - 10 de dezembro de 2025, Camberra, Austrália
39th Australasian Polymer Symposium (39APS)
leishman.eventsair.com/39aps

15 - 20 de dezembro de 2025, Honolulu, Havai
Pacifichem 2025
pacifichem.org

fevereiro de 2026

04 de fevereiro de 2026,
Frankfurt am Main, Alemanha
10th ECP – The first Industry Speed Dating Event
european-chemistry-partnering.com

10 de fevereiro de 2026, vários locais
IUPAC Global Women's Breakfast (#GWB2026)
iupac.org/gwb

10 - 11 de fevereiro de 2026, Telavive, Israel
89th Annual Meeting of the
Israel Chemical Society (ICS)
chemistry.org.il/conference

11 - 13 de fevereiro de 2026, Lisboa, Portugal
16th National Organic Chemistry Meeting
(16ENQO) e 9th National Medicinal and Biological
Chemistry Meeting (9ENQMB)
16enqo-9enqt.events.chemistry.pt

25 - 27 de fevereiro de
2026, Kloster Irsee, Alemanha
38th Irsee Natural Product Symposium
dechema.de/Irsee2026.html

março de 2026

02 - 04 de março de 2026,
Noordwijkerhout, Países Baixos
The Netherlands' Catalysis and
Chemistry Conference (NCCC)
n3c.nl

07 - 11 de março de 2026, Texas, EUA
Pittcon 2026
pittcon.org/pittcon-2026/

08 - 10 de março de 2026, Dortmund, Alemanha
SupraChem 2026
sites.google.com/view/suprachem

22 - 26 de março de 2026, Atlanta, EUA
ACS Spring 2026 National Meeting & Exposition
acs.org/meetings/acs-mee-
tings/future-meetings.html

24 - 27 de março de 2026, Munique, Alemanha
Analytica Conference 2026
analytica.de/en/munich

25 - 28 de março de 2026, Mosbach, Alemanha
77th Mosbacher Kolloquium: "More than lipidic
barriers: New horizons in membrane biology"
mosbacher-kolloquium.org/
77thMosbacherKolloquium.html

abril de 2026

15 - 16 de abril de 2026, Helsínquia, Finlândia
Helsinki Chemicals Forum (HCF) 2026
<https://helsinkichemicalsforum.messukeskus.com/>

28 - 29 de abril de 2026, Colónia, Alemanha
CO₂-Based Fuels and Chemicals Conference 2026
co2-chemistry.eu

maio de 2026

11 - 12 de maio de 2026, Lisboa, Portugal
Eurachem/CITAC Workshop: Accreditation of
Chemical Tests - Technical Challenges
eurachem2026.events.chemistry.pt

11 - 13 de maio de 2026, Kiel, Alemanha
Wasser 2026
[gdch.de/veranstaltungen/
tagungen/gdch-tagungen-2026.html](http://gdch.de/veranstaltungen/tagungen/gdch-tagungen-2026.html)

17 - 20 de maio de 2026, Lisboa, Portugal
XVII International Estuarine
Biogeochemistry Symposium (IEBS 2026)
iebs2026.events.chemistry.pt

25 - 29 de maio de 2026, Cartagena, Espanha
2nd International Conference on Green
and Sustainable Chemistry
isgreensc2026bnmc.org

junho de 2026

07 - 11 de junho de 2026, Lisboa, Portugal
20th International Conference on
Electroanalysis (ESEAC 2026)
eseac2026.events.chemistry.pt

07 - 12 de junho de 2026, Smolenice, Eslováquia
XXX International Conference on Coordination and
Bioinorganic Chemistry (ICCBIC)
iccbic.sk

julho de 2026

05 - 14 de julho de 2026, Tashkent, Uzbequistão
International Chemistry
Olympiad 2026 (IChO 2026)
chemistryviews.org/international-chemistry-olympiad-2026-icho-2026

12 - 16 de julho de 2026, Antuérpia, Bélgica
10th EuChemS Chemistry Congress (ECC10)
euchems2026.eu

13 - 17 de julho de 2026, Poznan, Polónia
9th International Symposium on Enhanced
Electrochemical Capacitors (ISEECap 2026)
chemistryviews.org/iseecap-2026

28 - 31 de julho de 2026, Sarawak, Malásia
51st IUPAC World Polymer
Congress 2026 (MACRO 2026)
macro2026.org

agosto de 2026

18 - 23 de Agosto de 2025, Tóquio, Japão
Tokyo Conference on Advanced Catalytic Science
and Technology (TOCAT10)
tocat.catsj.jp/10

setembro de 2026

07 - 09 de setembro de 2026, Friburgo, Alemanha
ORCHEM 2026
chemistryviews.org/orchem-2026

07 - 09 de setembro de 2026, Jena, Alemanha
GDCh Conference on Inorganic Chemistry 2026
chemistryviews.org/gdch-conference-on-inorganic-chemistry-2026

13 - 17 de setembro de 2026, Mainz, Alemanha
47th FGMR Annual Discussion Meeting
chemistryviews.org/47th-fgmr-annual-discussion-meeting

14 - 16 de setembro de 2026, tbd, Alemanha
30th Lecture Conference on Photochemistry (LCP 2026)
chemistryviews.org/30th-lecture-conference-on-photochemistry-lcp-2026

22 - 25 de setembro de 2026, Glasgow, Escócia
IWA World Water Congress & Exhibition 2026
worldwatercongress.org

22 - 25 de setembro de 2026, Bayreuth, Alemanha
Electrochemistry 2026
chemistryviews.org/electrochemistry-2026

Boletim da Sociedade
Portuguesa de Química

julho-setembro
Vol. 49 | N.º 178 | 2025

Química

