

# XXV ENCONTRO GALEGO-PORTUGUÉS DE QUÍMICA

20 al 22 de noviembre de 2019

Edificio Cinc. Ciudad de la Cultura

*Santiago de Compostela-Galicia (España)*



Colegío Oficial de  
**Químicos de Galicia**



SOCIEDADE  
PORTUGUESA  
DE QUÍMICA



ASOCIACIÓN DE  
QUÍMICOS DE GALICIA

**XXV ENCONTRO GALEGO-PORTUGUÉS DE QUÍMICA.**

**Noviembre 2019**

**Coordinador Editorial**

Cristina Díaz Barral

Manuel Rodríguez Ménez

**Edita**

Colegio Oficial de Químicos de Galicia

Rúa Lisboa, nº 10, Local 31E – Edificio Área Central Fontiñas.

15707 Santiago de Compostela (A Coruña)

[www.colquiga.org](http://www.colquiga.org)

**Tirada**

50 Ejemplares y 250 en formato digital

**Imprime**

OCERO

Sada (A Coruña)

**Depósito Legal**

VG699-2017

**ISBN**

978-84-09-16320-5

*Este libro de comunicaciones y conferencias, presentadas en el XXV Encontro Galego-Portugués de Química, Colegio Oficial de Químicos de Galicia*

**Catalogación recomendada** Libro de resúmenes del XXV Encontro Galego-Portugués de Química.

Edificio Cinc. Cidade da Cultura. Santiago de Compostela (España) 2019

**© Colegio Oficial de Químicos de Galicia**

*Derechos reservados. Prohibida la reproducción de este libro por cualquier medio, total o parcialmente, sin permiso expreso del editor.*

*El coordinador editorial declara que el contenido de los resúmenes científicos es de la entera responsabilidad de los respectivos autores.*

## ÍNDICE

INTRODUCCIÓN .....	7
LOCALIZACIÓN DEL XXV ENCONTRO GALEGO PORTUGUÉS DE QUÍMICA.....	8
INFORMACIÓN SOBRE EL CONGRESO .....	12
PROGRAMA DEL ENCONTRO .....	13
RELACIÓN DE CONFERENCIAS PLENARIAS.....	16
RELACIÓN DE COMUNICACIONES.....	17
CONFERENCIAS PLENARIAS .....	40
COMUNICACIONES ORALES.....	46
QUÍMICA ALIMENTARIA .....	47
QUÍMICA Y MEDIOAMBIENTE .....	62
BIOQUÍMICA Y BIOTECNOLOGÍA .....	82
CATÁLISIS Y FOTOCATÁLISIS .....	89
ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA .....	95
ELECTROQUÍMICA .....	99
QUÍMICA INDUSTRIAL E INGENIERÍA QUÍMICA.....	102
NANOQUÍMICA E NANOTECNOLOXÍA .....	110
QUÍMICA DE POLÍMEROS .....	120
QUÍMICA ANALÍTICA.....	124
QUÍMICA-FÍSICA.....	138
QUÍMICA INORGÁNICA.....	150
QUÍMICA ORGÁNICA .....	155
QUÍMICA Y SALUD .....	166
QUÍMICA TEÓRICA.....	195
COMUNICACIONES POSTER.....	200
QUÍMICA ALIMENTARIA .....	201
QUÍMICA Y MEDIOAMBIENTE .....	224
BIOQUÍMICA Y BIOTECNOLOGÍA .....	254
CATÁLISIS.....	263
ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA .....	271
QUÍMICA INDUSTRIAL.....	274
NANOQUÍMICA Y NANOTECNOLOGÍA.....	290
QUÍMICA DE POLÍMEROS .....	298
QUÍMICA ANALÍTICA.....	304

QUÍMICA FÍSICA.....	326
QUÍMICA INORGÁNICA.....	338
QUÍMICA ORGÁNICA .....	343
QUIMICA Y SALUD .....	359
QUÍMICA TEÓRICA.....	374
ÍNDICE DE AUTORES .....	377

## INTRODUCCIÓN

Un año más se celebra este congreso que reúne a los profesionales de la química de ambos lados del Miño. Este año se conmemora la 25ª Edición de este congreso internacional, en la misma ciudad donde nació y con la misma ilusión de la primera vez, aquel 14 de noviembre de 1985, cuando nos reunimos en Santiago de Compostela. Hoy lo hacemos con la convicción de haber superado las expectativas de aquellos pioneros que vieron necesario establecer un intercambio de conocimientos, que permitiese potenciar las relaciones interpersonales de los profesionales de la Química. Con el mismo espíritu, personas a ambos lados del Miño y de los 5 continentes, se reúnen para hablar de química.

Esta XXV edición del ENCONTRO GALEGO-PORTUGUÉS DE QUÍMICA ha sido organizada bajo los auspicios del Colegio Oficial de Químicos de Galicia, Asociación de Químicos de Galicia y Sociedade Portuguesa de Química.

### COMISIÓN DIRECTIVA

Manuel Rodríguez Méndez (COLQUIGA)  
José Luis Francisco Fuentes (COLQUIGA)  
José Ramón Bahamonde (COLQUIGA)  
José Luís Figueiredo (FEUP)  
José Luís Costa Lima (FFUP)  
Baltasar Romão de Castro (FCUP)

### COMISIÓN CIENTÍFICA

Tomas Lindahl. Premio Nobel de Química 2015  
Pilar Bermejo Barrera (USC)  
José Manuel Andrade Garda (UDC)  
José María Fernández Solís (UDC)  
Artur Silva (UA)  
Fernanda Proença (FCUP)  
Joaquim Luis Faria (FEUP)

### COMISIÓN ORGANIZADORA

José María Fernández Solís (UDC)  
Manuel Rodríguez Méndez (COLQUIGA)  
José Manuel Andrade Garda (UDC)  
José Luis Francisco fuentes (COLQUIGA)  
José Ramón Bahamonde Hernando (COLQUIGA)  
María Pastora Bello Bugallo (USC)  
Ana María Gayol González  
Emilio Manuel Osende Bardanca (COLQUIGA)

La Comisión Organizadora del XXV Encontro Galego-Portugués de Química, desea manifestar su agradecimiento a las siguientes instituciones:



CAT12 Hybrid nanomaterials for photocatalytic environmental applications

### **Educación y Enseñanza de la Química**

- EDU01 A ciência cidadã e as atitudes dos alunos face à disciplina de Físico-Química
- EDU02 Experimentos comestíveis ¿Se puede degustar la ciencia?
- EDU03 Diseño de un Sistema Automático para la Manipulación de Gases en el Aula
- EDU04 Práctica virtual de Laboratorio de Química: Determinación del calor de vaporización del agua
- EDU05 ExpHerimentando: una propuesta constructivista basada en un enfoque CTS (Ciencia, Tecnología y Sociedad)

### **Electroquímica**

- ELC01 Preparation of AuNPs nanocomposites for electroanalytical sensors development
- ELC02 Síntesis de clústeres de platino fotoquímica

### **Química Industrial e Ingeniería Química**

- IND00 Adsorption dynamics of CO<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub>/N<sub>2</sub> mixtures in zeolite 4A for Biogas Upgrading
- IND01 Fixed Bed Dynamics of Multicomponent Adsorption of Pentane and Hexane Isomers in ZIF-8
- IND02 Supercritical CO<sub>2</sub> extraction as green technology for obtainig coffee oil
- IND03 Lipofilização de antocianinas baseado na retenção de enzimas em membranas porosas
- IND04 Optimization of Nanoemulsion Formulations using Saponin from Quillaja Bark, a Natural Surfactant

## Fixed Bed Dynamics of Multicomponent Adsorption of Pentane and Hexane Isomers in ZIF-8

P. Brântuas<sup>1,2,\*</sup>, A. Henrique<sup>1,2</sup>, A. Rodrigues<sup>1</sup>, J. Silva<sup>1,2</sup>

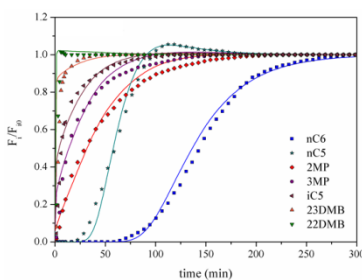
<sup>1</sup>Laboratory of Separation and Reaction Engineering - Laboratory of Catalysis and Materials (LSRE/LCM), Department of Chemical Engineering, Faculty of Engineering University of Porto, Rua Dr. Roberto Frias, S/N, 4200-465 Porto, Portugal

<sup>2</sup>Centro de Investigação de Montanha (CIMO), Instituto Politécnico de Bragança, Campus de Santa Apolónia, 5300-253 Bragança, Portugal

\*pedrobrantuas@ipb.pt

The separation of hydrocarbon mixtures is one of the most important topics in the petrochemical industry, including the separation of paraffins isomers in the C5/C6 range for the octane upgrading of gasoline. These processes separate low Research Octane Number (RON) linear paraffins, n-hexane (nC6) and n-pentane (nC5), from their respective branched isomers with higher RON content: 3-methylpentane (3MP), 2-methylpentane (2MP), *iso*-pentane (iC5), 2,3-dimethylbutane (23DMB) and 2,2-dimethylbutane (22DMB). In this context, metal organic frameworks (MOFs) have been studied for this process [1]. Due to their chemical and thermal stability, Zeolite Imidazolate Frameworks are of interest, specially ZIF-8 [2].

Septenary fixed bed breakthrough experiments of pentane and hexane isomers were performed with ZIF-8. The equimolar septenary studies were performed between 373 – 473 K and at a total hydrocarbon pressure of 25 kPa resulting in the following sorption hierarchy: nC6 > nC5 > 2MP > 3MP > iC5 > 23DMB > 22DMB as can be seen in Fig. 1 for the breakthrough experiment at 423 K. Results also show that the sorption of the linear nC5 and nC6 is equilibrium based in contrast with the sorption of branched isomers which is kinetically controlled. The equilibrium data were modelled by the Sips isotherm and the fitted parameters were used to simulate the breakthrough data through a mathematical model developed in a Matlab code using the method of lines (MOL).



**Fig. 1.** Experimental (points) and numerical (lines) breakthrough curves for a septenary (nC5/iC5/nC6/2MP/3MP/23DMB/22DMB) equimolar mixture of C5/C6 isomers in ZIF-8 at hydrocarbon total pressure of 25.0 kPa and at 423 K.

### Agradecimientos

We acknowledge financial support from (1) Project ref POCI01-0145-FEDER-016517 (PTDC/REQ-PRS/3599/2014) funded by FEDER through COMPETE2020 and FCT; (2) AIProcMat@N2020-Advanced Industrial Processes and Materials for a Sustainable Northern Region of Portugal 2020, with the reference NORTE-01-0145-FEDER-000006, supported by Norte Portugal Regional Operational Programme (NORTE 2020), under the Portugal 2020 Partnership Agreement, through the European Regional Development Fund (ERDF), and (3) by Project POCI-01-0145-FEDER006984-Associate Laboratory LSRE-LCM funded by ERDF through COMPETE2020, Programa Operacional Competitividade e Internacionalização (POCI), and by national funds through FCT - Fundação para a Ciência e a Tecnologia.

### Referencias

- [1] Separation of Hexane Isomers in ZIF-8 by Fixed Bed Adsorption. A. Henrique, A. Rodrigues, J. Silva, Ind. Eng. Chem. Res. 58 (2019) 378–394.
- [2] Exceptional chemical and thermal stability of zeolitic imidazolate frameworks. K. Park, Z. Ni, A. Cote, J. Choi, R. Huang, F. Uribe-Romo, H. Chae, M. O’Keeffe, O. Yaghi, Proc. Natl. Acad. Sci. 103 (2006) 10186–10191.