



XXII Encontro Luso-Galego  
**Química**

**9 a 11 novembro 2016**

Instituto Politécnico de Bragança | BRAGANÇA - PORTUGAL



## Livro de Resumos

<http://xxiilgq.eventos.chemistry.pt>



SOCIEDADE  
PORTUGUESA  
DE QUÍMICA



Colegio Oficial de  
Químicos de Galicia



**9 a 11 novembro 2016**

**Instituto Politécnico de Bragança  
BRAGANÇA – PORTUGAL**



**TÍTULO**

Livro de Resumos do XXII Encontro Luso-Galego de Química

**EDITORES**

Helder T. Gomes, Maria Olga A. S. Ferreira, João Barreira, Joana Amaral

**EDIÇÃO**

Sociedade Portuguesa de Química  
Av. da República, 45 – 3º Esq  
1050-187 Lisboa – Portugal

**DATA**

Novembro de 2016

**EXECUÇÃO GRÁFICA**

IPB, Soraia Maduro (design)  
Sersilito – Maia (impressão)

**FOTO DE CAPA**

Rami Arafah

**CATALOGAÇÃO RECOMENDADA**

Livro de Resumos do XXII Encontro Luso-Galego de Química  
Instituto Politécnico de Bragança, Bragança, Portugal, 2016, 336 páginas

**ISBN**

978-989-8124-17-3

**TIRAGEM**

350 exemplares

**@ Sociedade Portuguesa de Química**

Direitos reservados. Proibida a reprodução deste livro por qualquer meio, total ou parcialmente, sem autorização expressa da Sociedade Portuguesa de Química.

Os Editores declaram que o conteúdo dos resumos científicos é da inteira responsabilidade dos respetivos autores.

## **XXII ENCONTRO LUSO-GALEGO DE QUÍMICA**

Organizado sob os auspícios de  
Sociedade Portuguesa de Química  
Colégio Oficial de Químicos de Galicia

### **COMISSÃO DIRETIVA**

Baltazar Romão de Castro (FCUP)  
José Luís Costa Lima (FFUP)  
José Luís Figueiredo (FEUP)  
Pelayo Rubido Muñiz (COLQUIGA)  
Juan Mogin del Pozo (COLQUIGA)  
Antonio Macho Senra (COLQUIGA)

### **COMISSÃO CIENTÍFICA**

Joaquim Luís Faria (FEUP)  
Artur Silva (UA)  
Victor Freitas (FCUP)  
Mario Ferruzzi (NCSU, USA)  
Ignacio Pérez Juste (UVigo)  
Moisés Canle López (UdC)  
Pilar Bermejo Barrera (USC)

### **COMISSÃO ORGANIZADORA**

Helder Gomes (IPB) - Presidente  
Ana Isabel Pereira (IPB)  
Ana Vera Machado (UM)  
Baltazar Romão de Castro (FCUP)  
Filomena Barreiro (IPB)  
Isabel Ferreira (IPB)  
Joana Amaral (IPB)  
João Barreira (IPB)  
José Alcides Peres (UTAD)  
José Luís Costa Lima (FFUP)  
José Luís Figueiredo (FEUP)  
Lillian Barros (IPB)  
Manuel Coimbra (UA)  
Olga Ferreira (IPB)

## Comparison between FTIR-ATR and NIR spectroscopy for *Lavandula* honey characterization

**Ofélia Anjos<sup>1,2,3,\*</sup>, Ana Paula Pereira<sup>4</sup>, António J. A. Santos<sup>2</sup>,  
Letícia M. Estevinho<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>Instituto Politécnico de Castelo Branco, Apartado 119, 6001-909 Castelo Branco, Portugal

<sup>2</sup>CEF, Instituto Superior de Agronomia, Universidade de Lisboa, 1349-017 Lisboa, Portugal

<sup>3</sup>CBP-BI, Centro de Biotecnologia de Plantas da Beira Interior, Apartado 119,  
6001-909 Castelo Branco, Portugal

<sup>4</sup>Instituto Politécnico de Bragança, Apartado 1172, 5301-855 Bragança, Portugal

\**ofelia@ipcb.pt*

Spectroscopic methods have been widely used in the quality assessment of different matrices, among which food products [1,2,3]. The advantage of these analytical techniques is related to the minimal or no sample preparation, quickness of the procedure and potential to run multiple tests with only one sample. However, different methodologies may be applied, emphasizing the importance of identifying the most accurate method and equipment.

The aim of this work was to compare the performance of Near-infrared spectroscopy (NIR) and Fourier Transform infrared spectroscopic method with Attenuated Total Reflectance (FTIR-ATR) for the multivariate characterization of honey's chemical composition. In the first approach, the analysed parameters were: protein content (%), ascertained by the Kjeldahl method; and apparent sucrose content (%), evaluated according to the regulatory standards of International Honey Commission.

Partial least squares (PLS) regression was used to build the calibration model for these parameters, in comparison to the data obtained with the reference methods.

For the 150 *Lavandula* honey samples two different methodologies were tested: i) a calibration with cross validation followed by ii) a cross validation (70% of the samples) with a test set (remaining 30% of the samples).

The obtained models of suitable accuracy for protein content presented an  $r^2$  ranging from 96.7% to 81.8% (RPD = 5.5 to 2.4) for FTIR-ATR and between 89.4% and 77.6% (RPD = 3.1 to 2.1) for NIR. Concerning sucrose content,  $r^2$  was between 96.9% and 70.0% (RPD = 5.7 to 1.9) for FTIR-ATR, and between 88.5% and 64.4% (RPD = 3.0 to 1.9) for NIR. The root means square error of cross validation and prediction was lower using FTIR-ATR.

The precision achieved using these two parameters suggests that the infrared spectroscopy is a suitable technique for the characterization of honey samples. However, in general, FTIR-ATR appeared to be the most accurate method. Different models are in development for other chemical parameters comparing these two techniques.

### Acknowledgments

Centro de Estudos Florestais is a Research Unit funded by Fundação para a Ciência e a Tecnologia within UID/AGR/UI00239/2013

### References

- [1] S. Lohumi, S. Lee, H. Lee, B.K. Cho, Trends in Food Science & Technology, 46 (2015) 85-98.
- [2] O. Anjos, M.G. Campos, P.C. Ruiz, P. Antunes, Food Chemistry, 169 (2015) 218-223.
- [3] O. Anjos, A.J.A. Santos, L.M. Estevinho, I. Caldeira, Food Chemistry, 205 (2016) 28-35.