

XXII Encontro Nacional SPQ



SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE QUÍMICA

1911-2011

100 ANOS

100 anos
de Química
em Portugal



3 a 6

Julho de 2011

Universidade do Minho · Braga



Sociedade
Portuguesa
de Química



Universidade do Minho



Ano Internacional da
QUÍMICA

2011

XXII ENCONTRO NACIONAL DA
SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA – 100 ANOS DE QUÍMICA EM PORTUGAL

Depósito legal n.º 329450/11

ISBN: 978-989-8124-08-1

© Sociedade Portuguesa de Química

Editores: João Paulo André
Mário Berberan e Santos

Edição: Sociedade Portuguesa de Química

Capa: Nicolau Moreira
Gabinete de Comunicação, Informação e Imagem
UMinho

Montagem: Comissão Organizadora do XXII ENSPQ

Publicação parcialmente subsidiada pela
Fundação para a Ciência e a Tecnologia

Este livro foi produzido a partir dos resumos de comunicações submetidos pelos autores. Foram introduzidas apenas pequenas alterações de edição que não modificaram os conteúdos científicos. O modelo final de impressão foi definido para o XXII ENSPQ de acordo com as normas divulgadas publicamente nos anúncios deste evento. A responsabilidade dos conteúdos científicos é dos respectivos autores.

Rational design of thieno[3,2-*b*]pyridines as potential new VEGFR-2 inhibitors based on improved docking scores

Rui Abreu^a, Hugo J.C. Froufe^a, Isabel C.F.R. Ferreira^a, Maria-João R.P. Queiroz^b
^a CIMO-ESA, Instituto Politécnico de Bragança, Campus de Santa Apolónia, 1172, 5301-855 Bragança
^b Centro de Química, Universidade do Minho, Campus de Gualtar 4710-057 Braga
ruiabreu@ipb.pt; mjrpq@quimica.uminho.pt

Angiogenesis is the process of new blood vessel formation from pre-existing vascular networks by capillary sprouting, and plays an important role in the pathogenesis of several disorders including cancer, proliferative retinopathies and rheumatoid arthritis. A key regulatory pathway of angiogenesis is mediated by the vascular endothelial growth factor (VEGF) and its cell membrane tyrosine kinase receptor VEGFR-2 (also known as KDR kinase) [1]. Several VEGFR-2 inhibitors have emerged as promising anti-angiogenic agents for possible treatment against a wide variety of cancers including: sorafenib, sunitinib, and pazopanib, that have been approved for the treatment of advanced renal cell carcinoma. Several scaffolds have been studied for anti-VEGFR-2 activity as thieno[3,2-*b*]pyridines [2]. Recently, different series of thieno[3,2-*b*]pyridine derivatives, synthesized by Queiroz et al. [3-5] have presented anti-tumor activity but their anti-angiogenic activity was not evaluated yet. In this study libraries of thieno[3,2-*b*]pyridine derivatives were designed, generated and further investigated as potential VEGFR-2 inhibitors, using a VEGFR-2 flexible Glu886-Cys917 conformation and AutoDockVina as molecular docking software. Finally the docking pose of the thieno[3,2-*b*]pyridine derivatives with best docking scores were analyzed and these compounds can be considered good candidates for chemical synthesis as potential VEGFR-2 inhibitors.

Acknowledgements. FCT (Portugal), COMPETE and FEDER /QREN/EU for financial support through research project PTDC/QUI-QUI/111060/2009 (FCOMP-01-0124-FEDER-015603). R.M.V. Abreu thanks FCT, POPH-QREN and FSE for SFRH/PROTEC/49450/2009 grant.

References

- [1] Lemmon, M., Schlessinger, J. *Cell.*, 141(2010) 1117-1134. [2] Munchhof, M.J., Beebe, J.S., Casavant, J.M., Cooper B.A., Doty J.L., et al. *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 14 (2004) 21-24. [3] Calheta, R.C., Queiroz, M.-J.R.P. *Tetrahedron Lett.*, 51(2010) 281-283. [4] Queiroz, M.-J.R.P., Calheta, R.C., Vale-Silva, L.A., Pinto, E., Lima, R.T., Vasconcelos, M.H. *Eur. J. Med. Chem.*, 45 (2010) 5628-2634. [5] Queiroz, M.-J. R.P., Calheta, R.C., Vale-Silva, L., Pinto, E., Almeida, G.M., Vasconcelos, M.H. *Eur. J. Med. Chem.*, 46 (2011) 236-240.

XXII Encontro Nacional SPQ



SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE QUÍMICA

1911-2011

100 ANOS

100 anos
de Química
em Portugal



3 a 6

Julho de 2011

Universidade do Minho · Braga



SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE QUÍMICA



Universidade do Minho
Escola de Engenharia



Ano Internacional da
QUÍMICA
2011

XXII ENCONTRO NACIONAL DA
SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA – 100 ANOS DE QUÍMICA EM PORTUGAL

Depósito legal nº 329450/11

ISBN: 978-989-8124-08-1

© Sociedade Portuguesa de Química

Editores: João Paulo André
Mário Berberan e Santos

Edição: Sociedade Portuguesa de Química

Capa: Nicolau Moreira
Gabinete de Comunicação, Informação e Imagem
UMinho

Montagem: Comissão Organizadora do XXII ENSPQ

Publicação parcialmente subsidiada pela
Fundação para a Ciência e a Tecnologia

Este livro foi produzido a partir dos resumos de comunicações submetidos pelos autores. Foram introduzidas apenas pequenas alterações de edição que não modificaram os conteúdos científicos. O modelo final de impressão foi definido para o XXII ENSPQ de acordo com as normas divulgadas publicamente nos anúncios deste evento. A responsabilidade dos conteúdos científicos é dos respectivos autores.

PROGRAMA CIENTÍFICO

O programa científico consiste de lições plenárias, comunicações convidadas, comunicações orais e comunicações em painel, no âmbito dos seguintes tópicos/áreas científicas:

- Química Alimentar (QAlim)
- Química Analítica (QA)
- Química Física (QF)
- Química Inorgânica (QI)
- Química Orgânica (QO)
- Radicais Livres (RL)
- Ensino e Aprendizagem da Química (EAQ)
- Química e Sociedade (QSoc)

A sessão do dia 3 de Julho, as lições plenárias, as comunicações no âmbito da Medalha Vicente de Seabra, a mesa redonda e a sessão de encerramento decorrem no Auditório.

Domingo, 3 de Julho de 2011

- | | |
|-------------|--|
| 14:00-16:00 | Registo e entrega de documentação |
| 16:00-16:30 | Sessão de Abertura |
| 16:30-17:30 | Plenária Centenário da SPQ
PL1 – Sebastião Formosinho (Dep. Química, Univ. de Coimbra)
<i>100 Anos da Química em Portugal sob os auspícios da “Sociedade Portuguesa de Química”</i> |
| 17:30-17:45 | Intervalo para café |
| 17:45-18:45 | Plenária Prémio Ferreira da Silva 2010
PFS - Fernando Pina (REQUIMTE, Dep. Química, Univ. Nova de Lisboa)
<i>News from the Caparica photochemistry group. Chemistry is beautiful.</i> |
| 18:45-19:00 | Árias e duetos de ópera |
| 19:00-20:00 | Recepção – Verde de Honra |
| 20:15-..... | Teatro
<i>Maria Curie</i> , de Mira Michalowska, pelo Teatro Extremo |

Segunda-feira, 4 de Julho de 2011

- 09:00-09:45 **PL2** - Sir Thomas Blundell (Department of Biochemistry, University of Cambridge, Reino Unido)
Genomes, structural biology and drug discovery: opportunities for academia and industry

Química Orgânica (Auditório)

- 09:45-10:15 **QO-CC 1** - Pedro Góis (iMed, Fac. Farmácia, Univ. de Lisboa)
Cooperative metal-organo catalysis: the best of two worlds!
- 10:15-10:45 **QO-CC 2** - Teresa Pinho e Melo (Dep. Química, Univ. de Coimbra)
Allenes as versatile building blocks in the chemistry of heterocycles

Química Alimentar (Sala 1)

- 09:45-10:15 **QAlim-CC 1** - Isabel Mafra (REQUIMTE, Fac. Farmácia, Univ. do Porto)
Food allergens and the challenges for their detection
- 10:15-10:45 **QAlim-CC 2** - Sílvia Rocha (QOPNA e Dep. Química, Univ. de Aveiro)
Poderá a cromatografia compreensiva bidimensional fornecer mais e melhor informação sobre os alimentos?

Química Inorgânica (Sala 2)

- 09:45-10:15 **QI-CC 01** - Rita Delgado (ITQB-Univ. Nova de Lisboa e IST)
Copper(II) cryptates as potential radiopharmaceuticals and as receptor for anions
- 10:15-10:45 **QI-CC 02** – F. Almeida Paz (CICECO e Dep. Química, Univ. de Aveiro)
Design and preparation of functional metal-organic frameworks with lanthanides

Ensino e Aprendizagem da Química (Sala 3)

- 09:45-10:15 **EAQ-CC 1** - Victor Gil (Dep. Química, Univ. de Coimbra; Exploratório do Centro Ciência Viva, Coimbra)
Perguntas em Química: Os COMOS e os PORQUÊS

10:15-10:45 **EAQ-CC 02** - João Paiva (Centro de Investigação em Química, Dep. Química, Univ. do Porto)
Química, Poesia e Educação

10:45-11:15 Intervalo para café

Química Física (Auditório)

11:15-11:45 **QF-CC 1** - Maria Ermelinda Eusébio (Dep. Química, Univ. de Coimbra)
Polymorphism of organic compounds: structural and thermodynamic aspects

11:45-12:00 **QF-CO 01** - Igor Reva (Dep. Química, Univ. de Coimbra)
Interconversions in monomeric cytosine induced by tunable NIR and UV laser light

12:00-12:15 **QF-CO 02** - Jorge Morgado (Instituto de Telecomunicações, Dep. Eng. Química e Biológica, IST)
Fabrico de fios moleculares por self-assembly controlado por STM

12:15-12:30 **QF-CO 03** - Victor Ferreira (LCM, Laboratório Associado LSRE/LCM, Dep. Eng. Química, Univ. do Porto)
Modificação de Catalisadores de CeO₂ para o Acoplamento Oxidativo do Metano

12:30-12:45 **QF-CO 04** - Álvaro Cimas (Centro de Investigação em Química, Dep. Química e Bioquímica, Univ. do Porto)
The Reaction between P⁺ and Acetylene: A Theoretical Study

12:45-13:00 **QF-CO 05** - Ana Charas (Instituto de Telecomunicações, IST)
Organic Photovoltaic Cells with Nanostructured Polymer Layers

Química Analítica (Sala 1)

11:15-11:45 **QA-CC 01** - Marcela Segundo (REQUIMTE, Fac. Farmácia, Univ. do Porto)
Avaliação da capacidade antioxidante através da análise por injeção em fluxo

11:45-12:00 **QA-CO 01** - Manuel Matos (ADEQ, ISEL)
A Química analítica na defesa do consumidor

- 12:00-12:15 **QA-CO 02** - A. Furtado (Instituto Português da Qualidade)
Influence of the liquid properties in volumetric instruments accuracy
- 12:15-12:30 **QA-CO 03** - C. B. Lopes (CESAM e Dep. Química, Univ. de Aveiro)
Importância do controlo de qualidade analítica nas metodologias de remoção de mercúrio de águas
- 12:30-12:45 **QA-CO 04** - M. Malta (Instituto Tecnológico e Nuclear)
Determinação de Polónio-210
- 12:45-13:00 **QA-CO 05** - A. R. F. Siteo (Fac. Farmácia, Univ. de Lisboa)
Antimalarial compounds based on quinolimines scaffolds study by Electrospray ionization and triple quadrupole mass spectrometry (ESI-MS/MS)

Química e Sociedade (Sala 2)

- 11:15-11:45 **QSoc-CC 1** - Paula Branco (REQUIMTE, Dep. Química, Univ. Nova de Lisboa)
Química e Crime
- 11:45-12:00 **QSoc-CO 01** - F. A. Dias (Instituto Português da Qualidade)
A caminho da redefinição da mole
- 12:00-12:15 **QSoc-CO 02** - H. F. Silva (Dep. Eng. Química, ISEL)
Contribuição da química analítica para uma melhor sociedade - monitorização de metais pesados em ambiente urbano
- 12:15-12:30 **QSoc-CO 03** - M. J. S. M. Moreno (Fac. Farmácia e Centro de Química, Univ. de Coimbra)
Química medicinal e florestas em apólogo sinérgico
- 12:30-13:00 **QSoc-CC 2** - Raquel Gonçalves-Maia (Dep. Química e Bioquímica, Univ. de Lisboa)
O Laboratório de DOROTHY HODGKIN

Radicais Livres (Sala 3)

- 11:15-11:45 **RL-CC 1** - Pedro Santos (Instituto Tecnológico e Nuclear)
Antioxidising cascade mechanisms of protection against oxidative stress

- 11:45-12:00 **RL-CO 01** - M. A. Carvalho (Dep. Química, Univ. do Minho)
2-Phenolic-purines: synthesis and antioxidant activity
- 12:00-12:15 **RL-CO 02** - A. R. Lima (Univ. Federal de Lavras/MG – Brasil)
Café arábica e robusta: efeito da bebida descafeinada em ratos hipercolesterolémicos
- 12:15-12:30 **RL-CO 03** - F. S. Reis (Centro de Investigação de Montanha e Escola Superior Agrária, Instituto Politécnico de Bragança)
Tocoferóis e propriedades antioxidantes de fungos ectomicorrizicos in vivo e in vitro
- 12:30-12:45 **RL-CO 04** - N. Fernandes (CICS, Univ. da Beira Interior)
Antioxidant capacity of extracts from medicinal plants from Angola
- 12:45-13:00 **RL-CO 05** - D. Couto (REQUIMTE, Dep. Ciências Químicas, Fac. Farmácia, Univ. do Porto)
Trihydroxyflavones with antioxidant and anti-inflammatory capacity
- 13:00-14.30 Almoço
- 14.30-15.30 **POSTERS** – Sessão 1 (números ímpares)
- 15:30-16:15 **PL 3** - Jorge Rodriguez Navarro (Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Granada, Espanha)
Robust metal organic frameworks for the separation and purification of gases
- 16:15-16.45 Intervalo para café

Química Orgânica (Auditório)

- 16:45-17:00 **QO-CO 01** - Ana Maria F. Phillips (Dep. de Química, Univ. Nova de Lisboa)
Síntese enantioselectiva de análogos quirais de derivados do ácido fosfónico com actividade biológica

- 17:00-17:15 **QO-CO 02** - A. J. Burke (Dep. de Química e Centro de Química, Univ. de Évora)
Catalytic asymmetric imine arylation – an easy route to biologically active chiral amines
- 17:15-17:30 **QO-CO 03** - Hugo J. C. Froufe (CIMO-ESA, Instituto Politécnico de Bragança)
Rational design of thieno[3,2-b]pyridines as potential new VEGFR-2 inhibitors based on improved docking scores
- 17:30-17:45 **QO-CO 04** - M. Manuel Cruz Silva (Fac. de Farmácia, Univ. de Coimbra)
Biocatalysis as a tool for the regio- and stereoselective modification of bioactive steroids
- 17:45-18:00 **QO-CO 05** - Sandrina Silva (QOPNA, Dep. de Química, Univ. de Aveiro)
Functionalization of photosensitizers by dendritic units and their potential therapeutic applications

Química Alimentar (Sala 1)

- 16:45-17:00 **QAlim-CO 01** – J. Costa (REQUIMTE, Fac. Farmácia, Univ. do Porto)
Análise por “High Resolution Melting” como uma nova abordagem para a detecção de alergénios da amêndoa
- 17:00-17:15 **QAlim-CO 02** – A. C. Salvador (QOPNA, Dep. Química, Univ. de Aveiro)
Can volatile organic metabolites be used to simultaneously assess microbial and mite contamination level of cereal grains and coffee beans?
- 17:15-17:30 **QAlim-CO 03** – M. J. Ramalhosa (REQUIMTE/ISEP e Univ. do Porto)
Assessment of polycyclic aromatic hydrocarbons in highly consumed fish species in Portugal
- 17:30-17:45 **QAlim-CO 04** – V. Pereira (REQUIMTE, Fac. Farmácia, Univ. do Porto)
Optimization of a multi-residue analysis of pesticides in maize using a combination of QuEChERS and DLLME procedures followed by GC/MS

17:45-18:00 **QAlim-CO 05** – H. M. Lourenço (Instituto Nacional dos Recursos Biológicos, IPIMAR)
Elementos essenciais e tóxicos em produtos da pesca e aquicultura consumidos em Portugal

Química Inorgânica (Sala 2)

16:45-17:00 **QI-CO 01** - M. Abrantes (Centro de Química Estrutural, Complexo Interdisciplinar, IST)
Synthesis, structure and catalytic performance of a Mo^{VI} oxide/bipyridine hybrid material

17:00-17:15 **QI-CO 02** - H. I. S. Nogueira (CICECO, Dep. Química, Univ. de Aveiro)
Polyoxometalates in silica nanoparticles: multifunctional core/shell materials

17:15-17:30 **QI-CO 03** - A. Ruivo (REQUIMTE/Dep. Química e VICARTE, Univ. Nova de Lisboa)
Synthesis of Eu(II) glasses by sol-gel process using an ionic liquid

17:30-17:45 **QI-CO 04** - O. L. Rojas (Centro de Ciências Moleculares e Materiais, Dep. Química e Bioquímica, Univ. de Lisboa)
Synthesis and cytotoxicity of new ruthenium(II) complexes for antitumor application

17:45-18:00 **QI-CO 05** - A. P. Paiva (Centro de Química e Bioquímica, Dep. Química e Bioquímica, Univ. de Lisboa)
Extracção por solventes de prata de meios cloretados – 20 anos de investigação

Ensino e Aprendizagem da Química (Sala 3)

16:45-17:00 **EAQ-CO 01** - S. C. Leal (Dep. de Química e Bioquímica, Univ. de Lisboa)
Material didáctico/pedagógico para o ensino da Química

17:00-17:15 **EAQ-CO 02** - R. M. S. Sousa (Fábrica Centro Ciência Viva de Aveiro e CICECO/Dep. Química, Univ. de Aveiro)
Química num espectáculo para comunicar ciência

- 17:15-17:30 **EAQ-CO 03** - S. P. J. Rodrigues (Dep. Química, Univ. de Coimbra)
Passeios com química: uma oportunidade pedagógica e de divulgação
- 17:30-17:45 **EAQ-CO 04** - C. Teixeira (Centro de Química Estrutural, IST)
Microscopia Química: a beleza escondida das reacções químicas
- 17:45-18:00 **EAQ-CO 05** - T. Paiva (Colégio Salesiano Oficinas de S. José)
Normas de segurança nos laboratórios escolares
- 18:00-19:00 **Reuniões** das Divisões e do Grupo de Radicais Livres

Terça-feira, 5 de Julho de 2011

- 09:00-09:45 **PL 4** - Agílio Pádua (Laboratoire de Thermodynamique et Interactions Moléculaires, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand, França)
Ionic liquids: molecular interactions, solvation, interfaces

Química Física (Auditório)

- 09:45-10:15 **QF-CC 02** - Mara Freire (ITQB, Univ. Nova de Lisboa e CICECO, Univ. de Aveiro)
Phase equilibria of ionic liquids in aqueous environments
- 10:15-10:45 **QF-CC 03** - Verónica de Zea Bermudez (Dep. Química e CQ-VR, Univ. de Trás-os-Montes e Alto Douro)
Self-directed assembly in organic/inorganic hybrids

Química Analítica (Sala 1)

- 09:45-10:15 **QA-CC 2** - João Lopes (REQUIMTE, Fac. Farmácia, Univ. do Porto)
Fourier-transform infrared spectroscopy: an high-throughput method for pathogenic bacteria screening
- 10:15-10:45 **QA-CC 3** - Margarida Santos (Centro de Química Estrutural, IST)
Nickel speciation in xylem sap - an analytical approach

Ensino e Aprendizagem da Química (Sala 2)

- 09:45-10:15 **EAQ-CC 3** - Bernardo Herold (IST)
Hidretos parentais, nomenclatura aditiva e substitutiva ...
... Serão apenas nomes novos para conceitos velhos?
- 10:15-10:30 **EAQ-CO 06** - F. Oliveira (Museu da Ciência da Univ. de Coimbra, Laboratório Chimico)
Michael Faraday nos Laboratórios Chimicos. Recriação das demonstrações de A História Química de uma Vela

Radicais Livres (Sala 3)

- 09:45-10:15 **RL-CC 2** - Gonçalo Justino (Centro de Química Estrutural, IST)
Tio- and selenoflavones - potential roles in antioxidant chemistry and cell signaling modulation
- 10:15-10:45 **RL-CC 03** - Marisa Freitas (REQUIMTE, Dep. Química, Fac. Farmácia, Univ. do Porto)
Efeitos pró-inflamatórios do Ni(II) em neutrófilos humanos
- 10:45-11:15 Intervalo para café

Química Orgânica (Auditório)

- 11:15-11:45 **QO-CC 3** - Nuno Maulide (Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim an der Ruhr, Alemanha)
Cascade electrophilic rearrangements of amides
- 11:45-12:00 **QO-CO 06** - Ana M. G. Silva (REQUIMTE, Dep. Química, Univ. do Porto)
Design of porphyrin conjugates functionalized with peripheral 3,4-HPO chelating units
- 12:00-12:15 **QO-CO 07** - José C. J. M. D. S. Menezes (QOPNA, Dep. Química, Univ. de Aveiro)
Reaction of β -vinylporphyrins with ortho-quinone methides

- 12:15-12:30 **QO-CO 08** - Krassimira P. Guerra (iMed, Fac. de Farmácia, Univ. de Lisboa e CQFM e IN do IST)
New efficient syntheses of poly-hydroxylated cyclic enones via metal-organocatalyzed Morita-Baylis-Hillman reaction and tandem with cross-aldol reaction
- 12:30-12:45 **QO-CO 09** - M. Manuel B. Marques (REQUIMTE, Dep. Química, Univ. Nova de Lisboa)
Unexpected and intriguing reactivity of trifluoromethylated compounds with indole: a mechanistic investigation
- 12:45-13:00 **QO-CO 10** - Nuno R. Candeias (iMed, Fac. de Farmácia, Univ. de Lisboa)
Enantioselective syntheses of spirocyclopenteneoxindoles by a phosphine-catalyzed [3+2] cycloaddition reaction

Química Física (Sala 1)

- 11:15-11:30 **QF-CO 06** - Andreia C. Rodrigues (REQUIMTE, CQFB, Dep. Química, Univ. Nova de Lisboa)
Dielectric and thermal characterization of S-ibuprofen
- 11:30-11:45 **QF-CO 07** - Jorge Marques (Dep. Química, Univ. de Coimbra)
Energy landscapes of atomic and molecular clusters: global optimization with evolutionary algorithms
- 11:45-12:00 **QF-CO 08** - João Lima (REQUIMTE, Dep. Química, Univ. Nova de Lisboa)
Photophysical characterization of fluorophores on the vicinity of gold nanoparticles

Química Analítica (Sala 1)

- 12:00-12.15 **QA-CO 06** - Susana S. Pinto (RD-QAN, Hovione)
The importance of solid state characterization in the pharmaceutical industry: a case study

- 12:15-12:30 **QA-CO 07** - A.F.P. Gonçalves (Instituto Nacional de Medicina Legal e Dep. Química e Bioquímica e Centro de Química e Bioquímica, Univ. de Lisboa)
Desenvolvimento e validação de métodos para análise de estimulantes do tipo anfetamina em amostras biológicas
- 12:30-12:45 **QA-CO 08** - Nelson A.F. Silva (CIEQB-ISEL)
Caracterização da performance analítica de um biosensor potenciométrico para determinação de amidas tóxicas
- 12:45-13:00 **QA-CO 09** - Luís Cabrita (CIMO, Escola Superior Agrária, Instituto Politécnico de Bragança)
Avaliação da actividade antioxidante de extractos de plantas medicinais e aromáticas de Trás-os-Montes por métodos electroquímicos

Química Alimentar (Sala 2)

- 11:15-11:45 **QAlim-CC 3** - José Lagarón (IATA/CSIC, Universidad de Valencia, Espanha)
Nanotechnology to boost sustainability and innovation in polymeric packaging and coating applications
- 11:45-12:00 **QAlim-CO 06** – F. Coelho (REQUIMTE, Dep. Eng. Química, Univ. do Porto)
Production and characterization of keratin films to be used as an alternative to synthetic plastic
- 12:00-12:15 **QAlim-CO 07** – M. C. Santos (QOPNA, Dep. Química, Univ. de Aveiro)
Extra virgin olive oil flavoured with lemon peel using high hydrostatic pressure
- 12:15-12:30 **QAlim-CO 08** – C. Laranjeira (Escola Superior Agrária de Santarém)
Vinagres vínicos com adições
- 12:30-12:45 **QAlim-CO 09** – N. M. Bandarra (Instituto Nacional dos Recursos Biológicos, IPIMAR)
Silver scabbardfish: benefits and hazards associated to its consumption

12:45-13:00 **QAlim-CO 10** – C. G. Santos (REQUIMTE, Dep. Ciências Químicas, Fac. Farmácia, Univ. do Porto e Instituto Politécnico de Bragança)
Detecção de adulterações em alheiras de caça-identificação de carne de aves com base em marcadores moleculares

Química Inorgânica (Sala 3)

- 11:15-11:45 **QI-CC 3** - Dulce Belo (Instituto Técnico e Nuclear, CFMCUL)
Single component molecular metals in plastic electronics
- 11:45-12:00 **QI-CO 06** - J. Tedim (CICECO, Dep. Engenharia Cerâmica e do Vidro, Univ. de Aveiro)
Development of clay-based, nanostructured reservoirs for active corrosion protection
- 12:00-12:15 **QI-CO 07** - A. de Sá (Centro de Química, Univ. do Minho)
Mn(II)-NODAHep: a new amphiphilic contrast agent for MRI
- 12:15-12:30 **QI-CO 08** - C. S. B. Gomes (Centro de Química Estrutural, IST)
Oligomerisation of styrene catalysed by new indenyl nickel catalysts
- 12:30-12:45 **QI-CO 09** - M. G. Jardim (CQM-Centro de Química da Madeira, LQCMM/MMRG, Univ. da Madeira)
Iron-ruthenium metallodendrimers based on 2,4,6-tri-substituted-1,3,5-triazine core derivatives
- 12:45-13:00 **QI-CO 10** - M. Gil (Lab. HERCULES, Univ. de Évora e Centro de Física Atómica da Univ. de Lisboa)
Notas sobre o tipo e as alterações cromáticas de pigmentos azuis e verdes empregues em pinturas murais no Alentejo (séc. XVI-XVIII)
- 13:00-14.15 Almoço
- 14.15-15.00 **POSTERS** – Sessão 2 (números pares)

- 15:00-15:45 Plenária Prémio Romão Dias
PRD - Maria José Calhorda (Dep. Química e Bioquímica, Univ. de Lisboa)
Química organometálica: uma vida...
- 15:45-16:30 **PL 5** - Werner Pfannhauser (Institute of Food Chemistry and Technology,
University of Technology Graz, Áustria)
Developments in food analysis
- 16:30-..... Passeio ao Mosteiro de Tibães e jantar do Encontro

Quarta-feira, 6 de Julho de 2011

- 09:00-09:45 **PL 6** - Mehran Mostafavi (Laboratoire de Chimie Physique, Université Paris-
Sud, França)
*Nanoparticles of metal and semiconductor, the contribution of radiation
chemistry*

Química Orgânica (Auditório)

- 09:45-10:15 **QO-CC 4** - João Tomé (QOPNA, Dep. Química, Univ. de Aveiro)
Porphyrins and phthalocyanines designed for different applications
- 10:15-10:45 **QO-CC 5** - Maria do Sameiro Gonçalves (Centro de Química, Univ. do
Minho)
Benzo[a]phenoxazines as fluorescent probes for biomolecules

Química Física (Sala 1)

- 09:45-10:15 **QF-CC 4** - Sérgio Sousa (REQUIMTE, Dep. Química e Bioquímica, Univ.
do Porto)
*Application of computational methods in the determination of physical
chemical properties for biomolecular systems*
- 10:15-10:45 **QF-CC 5** - Maria João Melo (REQUIMTE-CQBF, Dep. Conservação e
Restauro, Univ. Nova de Lisboa)
The colour of portuguese medieval illuminations: a molecular perspective

Química Alimentar (Sala 2)

- 09:45-10:15 **QAlim-CC 4** - Maria Luísa Beirão (Centro de Engenharia de Biosistemas, Instituto Superior de Agronomia)
Processing effect on food bioactive compounds
- 10:15-10:30 **QAlim-CO 11** – A. S. G. Costa (REQUIMTE, Dep. Ciências Químicas, Fac. Farmácia, Univ. do Porto)
Avaliação do teor em compostos bioactivos e actividade antioxidante de sumos comerciais
- 10:30-10:45 **QAlim-CO 12** – A. P. Vale (REQUIMTE, Dep. Ciências Químicas, Fac. Farmácia, Univ. do Porto)
Influência do tempo de germinação na actividade antioxidante e no teor de compostos fenólicos de germinados de Brassica oleraceae

Química Inorgânica (Sala 3)

- 09:45-10:15 **QI-CC 4** - Ana Cristina Fernandes (Centro de Química Estrutural, IST)
Activation of X-H (X = Si, B, and P) bonds by high valent oxo-molybdenum and -rhenium complexes
- 10:15-10:45 **QI-CC 5** - Maria da Conceição Rangel (REQUIMTE, Instituto de Ciências Biomédicas de Abel Salazar, Univ. do Porto)
Hydroxypyridinones: chelators for novel therapeutic strategies
- 10:45-11.15 Intervalo para café

Química Analítica (Auditório)

- 11:15-11:45 **QA-CC 4** - Ivone Delgadillo (Dep. Química, Univ. de Aveiro)
Uso de métodos espectroscópicos na caracterização de produtos alimentares
- 11:45-12:15 **QA-CC 5** - Ana Brett (Dep. Química, Univ. de Coimbra)
DNA-electrochemical biosensors: characterization and in situ detection of oxidative damage

- 12:15-12:30 **QA-CO 10** - R. Oliveira (Dep. Química, Univ. do Minho)
Utilização de métodos electroquímicos na promoção da oxidação de proteínas para estudos de stress oxidativo
- 12:30-12:45 **QA-CO 11** - S. Ribeiro (REQUIMTE, ISEP)
Electrochemical biosensor based on tyrosinase immobilized on 3D gold nanoelectrode ensembles for the determination of L-Dopa
- 12:45-13:00 **QA-CO 12** - Georgina M.S. Alves (REQUIMTE, Dep. Eng. Química, Univ. do Porto)
Simultaneous electrochemical determination of arsenic, copper, lead and mercury, at trace levels, using a vibrating gold microwire electrode

Química Alimentar (Sala 1)

- 11:15-11:30 **QAlim-CO 13** – R. Gonçalves (Fac. Ciências, Univ. do Porto)
Inhibition of pancreatic lipase by phenolics
- 11:30-11:45 **QAlim-CO 14** – A. Fernandes (Centro de Investigação de Montanha, Escola Superior Agrária, Instituto Politécnico de Bragança)
Aplicação de irradiação- γ como método de conservação da castanha-análise de parâmetros nutricionais

Radicais Livres (Sala 1)

- 11:45-12:00 **RL-CO 06** - S. A. Heleno (Centro de Investigação de Montanha, Escola Superior Agrária e Centro de Química da Univ. do Minho)
Phenolic compounds and antioxidant activity of fruiting body and spores of wild Ganoderma lucidum
- 12:00-12:15 **RL-CO 07** - D. Ribeiro (REQUIMTE, Dep. Ciências Químicas, Fac. Farmácia, Univ. do Porto)
Inhibition of human neutrophil oxidative burst mediated by flavonoids
- 12:15-12:30 **RL-CO 08** - J. Pinela (Centro de Investigação de Montanha, Escola Superior Agrária, Instituto Politécnico de Bragança)
Efeito do processo de secagem no potencial antioxidante de plantas medicinais da família Fabaceae

Química Orgânica (Sala 1)

- 12:30-12:45 **QO-CO 11** - Andreia F. Peixoto (Dep. Química, Univ. de Coimbra)
Carbonylation reactions: a versatile and green approach for preparation of high value products
- 12:45-13:00 **QO-CO 12** - Andreia A. Rosatella (iMed, Fac. Farmácia, Univ. de Lisboa)
Synthesis of trans-1,2-diols in water

Química Física (Sala 2)

- 11:15-11:30 **QF-CO 09** - N. Mahata (Laboratório de Catálise e Materiais, Laboratório Associado LSRE/LCM, Dep. Eng Química, Univ. do Porto)
Highly selective hydrogenation of C=C double bond in unsaturated carbonyl compounds over NiC catalyst
- 11:30-11:45 **QF-CO 10** - N. M. F. S. A. Cerqueira (REQUIMTE, Fac. Ciências, Univ. do Porto)
Computational studies addressed to the activation of PLP dependent enzymes
- 11:45-12:00 **QF-CO 11** - L. Peixoto (IBB, Centro de Eng. Biológica, Univ. do Minho)
Kinetic study of the redox processes in carbon electrodes with Geobacter sulfurreducens at different growth temperatures
- 12:00-12:15 **QF-CO 12** - Marta Ferreira (Dep. Química e Centro de Química, Univ. do Minho)
Oxidação electrocatalítica de poluentes orgânicos em águas, por eléctrodos modificados de nanotubos de carbono

Química Inorgânica (Sala 2)

- 12:15-12:30 **QI-CO 11** - Ana S. D. Ferreira (CQE, Complexo I, IST)
Novel palladium(II) camphor complexes

12:30-12:45 **QI-CO 12** - L. S. Ribeiro (LCM, Laboratório Associado LSRE/LCM, Dep. Eng. Química, Univ. do Porto)
Síntese de nanopartículas de sílica mesoporosas com corantes termo- e fotocromicos para aplicação têxtil

Química e Sociedade (Sala 3)

11:15-11:45 **QSoc-CC 3** - Joana Moura (Cooking. Lab, INOVISA)
Gastronomia molecular: ciência, cozinha e arte

11:45-12:15 **QSoc-CC 4** - Maria Clara Magalhães (Dep. Química, Univ. de Aveiro)
Rochas e minerais no objecto de arte. As transformações, as reacções e o tempo

12:15-12:30 **QSoc-CO 04** - R. F. M. Frade (iMed, Fac. Farmácia, Univ. de Lisboa)
Toxicity evaluation of a wide range of structurally different ionic liquids

12:30-12:45 **QSoc-CO 05** - T. P. Santos (CQB da Fac. Ciências, Univ. de Lisboa e ICEMS, IST)
Estudo da consolidação e protecção de azulejos antigos

12:45-13:00 **QSoc-CO 06** - C. Miguel (REQUIMTE e Dep. de Conservação e Restauro, Univ. Nova de Lisboa)
"Oitocentos Anos de (al)Química em Portugal"

13:00-14.15 Almoço

14.15-15.15 **Mesa redonda** Prémios Ferreira da Silva

15:15-16:00 **PL 7** - Carlos Geraldés (Departamento de Ciências da Vida, Universidade de Coimbra)
NMR as a research tool: from molecular structure to molecular imaging

16:00-16.15 Intervalo para café

- 16:15-16:45 Medalha Vicente de Seabra
MVS-1 - Eurico J. Cabrita (REQUIMTE, CQFB, Dep. Química, Univ. Nova de Lisboa)
In resonance with Chemistry
- 16:45-17:15 Medalha Vicente de Seabra
MVS-2 - José R. B. Gomes (CICECO, Dep. Química, Univ. de Aveiro)
Exploring mechanisms of chemical reactions at surfaces
- 17:15-17:30 Sessão de Encerramento
- 17:30..... Assembleia Geral da SPQ