

XXIII ENCONTRO GALEGO-PORTUGUÉS DE QUÍMICA

15 al 17 de noviembre de 2017

Centro de Innovaciones y Servicios C.I.S.

Ferrol-Galicia (España)



Colegio Oficial de
Químicos de Galicia



SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE QUÍMICA

**XXIII ENCONTRO GALEGO-PORTUGUÉS DE QUÍMICA.
Noviembre 2017**

Coordinador Editorial

Cristina Díaz Barral
Manuel Rodríguez Méndez

Edita

Colegio Oficial de Químicos de Galicia Rúa Urzaiz, 1 – 2º dcha.
36201 Vigo (Pontevedra)
www.colquiga.org

Portada

Imagen: Designed by Freepik.com

Tirada

250 Ejemplares

Imprime

OCERO
Sada

Depósito Legal

VG699-2017

ISBN

978-84-697-7356-7

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

Catalogación recomendada Libro de resúmenes del XXIII Encontro Galego-Portugués de Química. Centro de Innovaciones y Servicios (CIS). Ferrol (España) 2017

© 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.

INDICE

INTRODUCCIÓN	5
LOCALIZACIÓN DEL XXIII ENCONTRO GALEGO PORTUGUES DE QUÍMICA	6
INFORMACIÓN SOBRE EL CONGRESO	8
PROGRAMA DEL ENCONTRO	9
IDENTIFICACIÓN DE LAS CONFERENCIAS PLENARIAS	11
DISTRIBUCIÓN DE COMUNICACIONES	12
CONFERENCIAS PLENARIAS	21
COMUNICACIONES ORALES	31
Química agrícola	33
Química alimentaria	39
Química y medio ambiente	51
Bioquímica y biotecnología	65
Catálisis	69
Educación	83
Química industrial e ingeniería química	87
Nanoquímica y nanotecnología	95
Química de polímeros	103
Química analítica	107
Química física	115
Química inorgánica	121
Química orgánica	125
Química y salud	129
PÓSTER	133
Química agrícola	135
Química alimentaria	139
Química y medio ambiente	151
Bioquímica y biotecnología	175
Catálisis	185
Educación	193
Química e industria	197
Nanoquímica y nanotecnología	213
Química de polímeros	221
Química analítica	231
Química física	237
Química inorgánica	241
Química orgánica	249
Química y salud	255
Seguridad química	259
ÍNDICE DE AUTORES	263

INTRODUCCIÓN

Un año más se celebra este congreso que reúne a los profesionales de la química de ambos lados del Miño. Con la misma ilusión de la primera vez, aquel 14 de noviembre de 1985, cuando nos reunimos en Santiago de Compostela algo nerviosos, pero con la convicción, de que era necesario establecer un intercambio de conocimientos, que permitiese potenciar las relaciones interpersonales de los profesionales de la Química. Ahora serán 32 años compartiendo investigación y experiencias.

Esta XXIII 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

Wolfgang Parak (Marburgo)
José Manuel Andrade Garda (UDC)
Carlos Herrero Latorre (USC)
Ignacio Pérez Juste (UVIGO)
Artur Silva (UA)
Victor Freitas (FCUP)
Joaquim Luis Faria (FEUP)

COMISIÓN ORGANIZADORA

José María Fernández Solís (UDC)
Manuel Rodríguez Méndez (COLQUIGA)
José Manuel Andrade Garda (UDC)
Fernando Barbadillo Jove (UDC)
José Luis Mier Buenhombre (UDC)
Antonio Santiago Penín (NAVANTIA)
Hervilia María Seco Lago (COLQUIGA)
David Ausín Neira (UDC)
M^a Paz Gómez Carracedo (UDC)

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



receptor de estrógeno

- QIN03 Design, synthesis and characterization of novel heterotrinary palladium (II) compounds bearing ferrocene phosphine
- QIN04 Ligandos imino-fosfina en la obtención de complejos de Pd y Pt
- QIN05 Aproximación sintética a helicates metálicos a partir de bases de Schiff funcionalizadas con grupos tert-butilo
- QIN06 Bis-metallated Schiff bases: Palladacycles with two Pd-C bonds
- QIN07 Palladium and platinum cyclometallated iminophosphoranes

Química Orgánica

- QO01 MW-assisted synthesis of fused polycyclic compounds
- QO02 Conjugate additions of carbon nucleophiles to chromones substituted with extended π -systems at C-2
- QO03 From Hydrindane to Decalin
- QO04 Síntesis, caracterización y actividad biológica de éteres fenólicos derivados de la 1,4-naftoquinona
- QO05 Ethoxylated serine-based surfactants: synthesis and study of the aggregation properties

Química y Salud

- SAU01 Multifunctional graphene-based magnetic nanocarriers optimized with copolymer Pluronic F127 for biomedical applications
- SAU02 Effect of β -Carotene and its oxidation products in the oxidative burst of human neutrophils
- SAU03 Apoptotic and necrotic effects of 3',4'-dihydroxyflavonol on the MG-63 cell line

Seguridad Química

- SQ01 Evaluación de riesgos laborales por exposición a sulfuro de hidrógeno y amoníaco en el área de compostaje en una planta de biometanización de los residuos doméstico

Conjugate additions of carbon nucleophiles to chromones substituted with extended π -systems at C-2

Hélio M. T. Albuquerque^{1,*}, Clementina M. M. Santos^{1,2}, Mannix P. Balanay³, José A. S. Cavaleiro¹, Artur M. S. Silva¹

¹Department of Chemistry & QOPNA, University of Aveiro, Campus de Santiago, 3810-193 Aveiro, Portugal;

²School of Agriculture, Polytechnic Institute of Bragança, Campus de Santa Apolónia, 5300-253 Bragança, Portugal; ³Department of Chemistry, Nazarbayev University, 53 Kabanbay Batyr Ave, Block 7, Astana 010000, Kazakhstan

*helio.albuquerque@ua.pt

The conjugate addition of carbon nucleophiles to electron deficient alkenes is an important method for carbon-carbon bond formation [1]. Generally, 1,4-conjugate addition reactions are more developed than its analogous 1,6- or 1,8-additions, mainly due to the presence of several electrophilic sites in extended conjugated systems as well as the inherent difficulties in controlling the regioselectivity (1,4- vs. 1,6- vs. 1,8-addition) [1].

In this work, we provide new experimental and computational insights about the reactivity of the 3,2: $\alpha,\beta,\gamma,\delta$ -triunsaturated system of the 2-[(1*E*,3*E*)-4-arylbuta-1,3-dien-1-yl]-4*H*-chromen-4-ones **1** in conjugate addition reactions with carbon nucleophiles (Figure 1). The 1,6-conjugate addition of nitromethane to chromones **1** afforded the corresponding β -(nitromethyl)chromones **2** as major products. (*E*)-5'-(Nitromethyl)-3'-styryl-[1,1'-biphenyl]-2-ols **3** and 3'-aryl-2'-nitro-5'-(nitromethyl)spiro[chromane-2,1'-cyclohexan]-4-ones **4** were also isolated as minor products, which result from tandem reactions [2].

The nucleophile scope (malononitrile, acetylacetonate, diethyl malonate and ethyl cyanoacetate) of this reaction was also assessed and gave, in all cases, the expected 1,6-addition products **5** as major products. Computational calculations showed that the reaction is probably kinetically driven towards 1,6-addition. The further functionalization of some adducts allowed the preparation of new nitrogen-containing heterocyclic compounds, such as pyrazole derivative **6** and styrylpyrrolidines **7** [2].

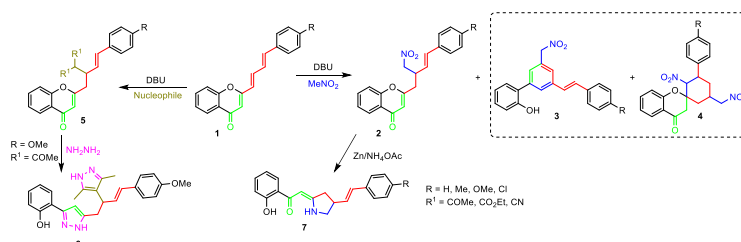


Fig.1. Conjugate additions to chromones **1** and further functionalizations of some obtained adducts.

Acknowledgements

Thanks are due to the University of Aveiro and Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT) / Ministério da Educação e Ciência (MEC) for the financial support of the QOPNA research unit (FCTUID/QUI/00062/2013) through national funds and, where applicable, cofinanced by Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional (FEDER) within the PT2020 Partnership Agreement, and to the Portuguese NMR Network as well as the Polytechnic Institute of Bragança. H. M. T. A. is grateful to FCT for his PhD grant (SFRH/BD/86277/2012).

References

- [7] A. G. Csáký, G. de la Herrán, M. C. Murcia, Chem. Soc. Rev. 39 (2010), 4080.
- [8] H. M. T. Albuquerque, C. M. M. Santos, M. P. Balanay, J. A. S. Cavaleiro, A. M. S. Silva, Eur. J. Org. Chem. (2017), 5293.