



ASOCIACIÓN DE
QUÍMICOS DE GALICIA



Colexio Oficial de
Químicos de Galicia



SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE QUÍMICA



**XXVI ENCONTRO GALEGO
CONGRESO PORTUGUÉS DE QUÍMICA
INTERNACIONAL**



abajando a
ad, en la salud, el amb
alimentaria



2022

16 17 18 NOVIEMBRE

SANTIAGO DE COMPOSTELA

WWW.ENCONTROGALEGOPTUGUES.ORG

FACULTAD DE QUÍMICA



XXVI ENCONTRO GALEGO-PORTUGUÉS DE QUÍMICA.

Noviembre 2022

Coordinador Editorial

Manuel Rodríguez Méndez

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

Tirada

30 Ejemplares y 450 en formato digital

Imprime

OCERO
Sada (A Coruña)

Depósito Legal

VG699-2017

ISBN

978-84-09-45895-0

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 XXVI Encontro Internacional Galego-Portugués de Química.

Facultade de Química da Universidade de Santiago de Compostela. Santiago de Compostela (España) 2022

© **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 XXVI ENCONTRO INTERNACIONAL GALEGO PORTUGUÉS DE QUÍMICA	8
INFORMACIÓN SOBRE EL CONGRESO.....	10
PROGRAMA DEL XXVI ENCONTRO INTERNACIONAL GALEGO PORTUGUÉS DE QUÍMICA	12
RELACIÓN DE CONFERENCIAS PLENARIAS	15
RELACIÓN DE COMUNICACIONES.....	16
CONFERENCIAS PLENARIAS.....	43
COMUNICACIONES ORALES	49
QUÍMICA ALIMENTARIA	50
QUÍMICA AMBIENTAL Y SOSTENIBLE.....	82
BIOQUÍMICA Y BIOTECNOLOGÍA	118
CATÁLISIS Y FOTOCATÁLISIS	124
ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA	147
QUÍMICA INDUSTRIAL E INGENIERÍA QUÍMICA	151
NANOQUÍMICA Y NANOTECNOLOGÍA	165
QUÍMICA DE POLÍMEROS	186
QUÍMICA ANALÍTICA.....	189
QUÍMICA-FÍSICA.....	216
QUÍMICA INORGÁNICA.....	229
QUÍMICA ORGÁNICA	238
QUÍMICA Y SALUD	263
QUÍMICA TEÓRICA.....	312
COMUNICACIONES PÓSTER	320
QUÍMICA ALIMENTARIA	321
QUÍMICA AMBIENTAL Y SOSTENIBLE.....	370
BIOQUÍMICA Y BIOTECNOLOGÍA	412
CATÁLISIS Y FOTOCATÁLISIS	418
ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA	433
QUÍMICA INDUSTRIAL E INGENIERÍA QUÍMICA	437
NANOQUÍMICA Y NANOTECNOLOGÍA	467
QUÍMICA ANALÍTICA.....	482
QUÍMICA FÍSICA	521
QUÍMICA INORGÁNICA.....	532
QUÍMICA ORGÁNICA	543
QUÍMICA Y SALUD	563
QUÍMICA TEÓRICA.....	598
ÍNDICE DE AUTORES	600

INTRODUCCIÓN

Un año más, y este año en especial, celebramos este congreso que reúne a los profesionales de la química no sólo de ambos lados del Miño, sino de todo el mundo. Este año se conmemora la 26ª 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, en esta Facultad de Química que este año celebra el Centenario de su fundación. Este es un Congreso especial, es el primero que celebramos después de las restricciones originadas por la pandemia causada por la Covid-19. Con el mismo espíritu con el que se crearon estos ENCONTROS, y con el recuerdo puesto en aquellas personas queridas que ya no están con nosotros, nos volvemos a reunir para hablar de química.

Esta XXVI 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, sin olvidar a nuestros mentores y con un recuerdo especial para el Prof. José Luis Costa Lima que nos dejó para seguir nuevos rumbos, seguro que en la química.

COMISIÓN DIRECTIVA:

José Luis Francisco Fuentes. Colegio Oficial de Químicos de Galicia. España

Prof. Joaquim Luis Faria. Sociedade Portuguesa de Química, Faculdade de Engenharia, Univ. Porto, Portugal

José Ramón Bahamonde Hernando. Colegio Oficial de Químicos de Galicia. España.

Prof. Baltasar Romão de Castro. Sociedade Portuguesa de Química, Faculdade de Ciências, Univ. Porto, Portugal

Manuel Rodríguez Méndez. Colegio Oficial de Químicos de Galicia.

Prof. Dr. Carlos M.M. Afonso. Sociedade Portuguesa de Química, Faculdade de Farmácia, Univ. Porto, Portugal

Prof. Dr. Victor A. Pereira Freitas. Sociedade Portuguesa de Química, Faculdade de Ciências, Univ. Porto, Portugal

COMISIÓN CIENTÍFICA:

Prof. Pilar Bermejo Barrera. Dpto. Química Analítica, Univ. de Santiago de Compostela

Prof. María de Los Ángeles Peña Gallego. Dpto. Química Física, Univ. de Vigo

Prof. Dr. José María Fernández Solís. Escuela Politécnica Enxeñaría de Ferrol, Univ. da Coruña

Prof. Dr. Artur M. Soares da Silva. Sociedade Portuguesa de Química, Univ. Aveiro, Portugal

Prof. Dra. Maria Fernanda Proença. Sociedade Portuguesa de Química, Univ. Minho, Portugal

Prof. Dr. Victor A. Pereira Freitas. Sociedade Portuguesa de Química, Faculdade de Ciências, Univ. Porto, Portugal

COMISIÓN ORGANIZADORA

Prof. Pastora Bello Bugallo. Dpto. Ingeniería Química, ETSIQ, Universidade de Santiago de Compostela

Prof. Dr. José Manuel Andrade Garda. Dpto. Química Analítica, Universidade da Coruña

Carlos Vales Fernández. Colegio Oficial de Químicos de Galicia

Ana María Gayol González. Colegio Oficial de Químicos de Galicia

Juan José Sanmartín Rodríguez. Colegio Oficial de Químicos de Galicia

Juan José Losada López (ENCE)

Francisco Javier Becerra García. Colegio Oficial de Químicos de Galicia

Manuel Rodríguez Méndez. Colegio Oficial de Químicos de Galicia y la Comisión Organizadora del XXVI Encontro Internacional Galego-Portugués de Química, desea manifestar su agradecimiento a las siguientes instituciones:



- QA15 Development of a new mesofluidic platform to assess metal-based dihydrofolate reductase inhibitors.
- QA16 Estudio fluorescente de la amina biógena Triptamina y su aminoácido precursor (Triptófano).
- QA17 Validation of a method to quantify essential and potentially toxic elements in raw and cooked food matrices.
- QA18 *In vitro* inhalation bioaccessibility estimation of atmospheric PM-associated organic compounds using simulated biological fluids.
- QA19 Automatic identification of myeloperoxidase natural inhibitors in plant extracts.
- QA20 As vantagens do uso da quimiometria na química analítica.
- QA21 Low pressure chromatographic system with multiple pulse amperometric detection for multi-analyte determination in green coffee extracts.
- QA22 Quantitative analysis of phosphopeptide enrichment methods.
- QA23 Overcoming the seawater trace elements analysis challenge in a SPE-flow-based approach.
- QA24 Finding biomarkers of ruminal acidosis through targeted and untargeted metabolomic analysis through *in vitro* rumen fermentation assays.
- QA25 Renewable immunosensors based on lab-on-valve flow systems.
- QA26 Detetores baseados em imagem: desenvolvimento e aplicação.

Póster/Panel

- QA27 Polycyclic Aromatic Hydrocarbons Determination in Human Adipose Tissue.
- QA28 Aplicaciones De La Microscopía RAMAN Confocal.
- QA29 Paper-based analytical devices for instrumental and smartphone-based fluorimetric sensing of environmentally relevant inorganic species.
- QA30 Development of a novel cost-effective method for the density separation of microplastics from marine sediments, followed by quantitative ¹H-nuclear magnetic resonance spectroscopy determination.
- QA31 Determination of Sulfide in Waters by Smartphone-Based In-Drop Colorimetric Plasmonic Sensing involving hydrophobized PADs.
- QA32 Occurrence and persistence of fungicides and insecticides in vineyard soils.
- QA33 GC-MS screening method for the identification of semi-volatile compounds in bio-based and biodegradable food packaging materials.
- QA34 Composição fenólica e atividade biológica de extratos de casca e ramos de *Juniperus communis* L. (zimbros comú).
- QA35 Evaluación de la presencia de residuos de fungicidas e insecticidas en cerveza mediante cromatografía de líquidos y espectrometría de masas en tándem.

Composição fenólica e atividade biológica de extratos de casca e ramos de *Juniperus communis* L. (zimbros comum)

Virginie Xavier^{1,2}, Tiane C. Finimundy^{1,2}, Joana S. Amaral^{1,2}, José Pinela^{1,2}, Ricardo C. Calheta^{1,2}, Izamara de Oliveira^{1,2}, Irene Mediavilla³, Luis Saúl Esteban³, Isabel C.F.R. Ferreira^{1,2}, Sandrina A. Heleno^{1,2}, Lillian Barros^{1,2*}

¹Centro de Investigação Montanha (CIMO), Instituto Politécnico de Bragança, Campus Santa Apolónia, 5300-253 Bragança, Portugal

²Laboratório Associado para a Sustentabilidade e Tecnologia em Regiões de Montanha (SusTEC), Instituto Politécnico de Bragança, Campus Santa Apolónia, 5300-253 Bragança, Portugal

³CEDER-CIEMAT, Autovia de Navarra A-15, Salida 56, 42290 Lobia, Spain

*lillian@ipb.pt

A espécie *Juniperus communis* L., comumente designada “zimbros” em Portugal, é uma conífera, pertencente à família Cupressaceae e adaptada à baixa disponibilidade de nutrientes no solo.

O zimbros foi usado na medicina tradicional para tratar infeções urinárias, dermatites ou como diurético, entre outros, dada a sua composição em bioativos como compostos fenólicos, terpenóides e ácidos orgânicos. Nos últimos anos, vários estudos reportam o seu potencial antimicrobiano, antioxidante, anti-inflamatório, efeitos anti-diabéticos, hipocolesterolémicos e ainda a sua ação neuroprotetora, bem como capacidade antiproliferativa contra células cancerígenas e a capacidade de ativar mecanismos hepatorreais e gastroprotetores [1,2].

No âmbito do presente trabalho, que surge no contexto do projeto BBI-JU BeonNAT, a casca do zimbros foi separada da parte aérea e posteriormente moída à parte da restante biomassa (parte aérea composta por ramos e agulhas) para comparar estas duas frações ao mesmo tempo que se pretende aproveitar todas as partes da planta, promovendo um conceito de economia circular.

Depois de moídas, as amostras foram extraídas por maceração e a composição fenólica de cada fração de biomassa foi analisada por HPLC-DAD-ESI/MS, onde 17 compostos foram identificados na casca e 14 compostos na restante biomassa. Enquanto que na casca foram apenas identificados flavan-3-ols, na parte aérea a maior parte dos compostos são flavonoides (10 identificados), seguido de 2 flavan-3-óis e ainda 2 ácidos fenólicos, sendo o composto maioritário, nos dois casos, um dímero de procyanidina.

Para avaliar a biotividade dos extratos, realizou-se a análise antimicrobiana por microdiluição, utilizando bactérias Gram-positivas e Gram-negativas, isoladas de ambiente clínico e alimentar. A atividade antioxidante foi realizada por duas metodologias distintas: inibição da peroxidação lipídica em tecidos cerebrais de porco (TBARS) e inibição da hemólise oxidativa (OxHLIA), onde o extrato da casca de zimbros mostrou mais promissor, apresentando um EC₅₀ mais baixo (TBARS: EC₅₀=11.30±0.88 µg/mL e OxHLIA: 14.9±0.5 µg/mL) em comparação com o extracto da parte aérea (TBARS: EC₅₀=25.89±0.62 µg/mL e OxHLIA: 47±1 µg/mL). Por sua vez, a citotoxicidade foi avaliada numa cultura de células não tumorais: PLP2 (cultura primária de células de fígado de porco), em que ambos os extratos apresentaram toxicidade para esta linha celular. No entanto, de acordo com a aplicação-alvo, a toxicidade apresentada pelos extratos deve ser analisada mais profundamente, verificando esta condição em modelos de toxicidade específicos para cada indústria/produto. No geral, tendo em conta a composição química e as bioatividades comprovadas, os extratos quer da casca, quer da parte aérea do zimbros são potenciais matérias-primas para o desenvolvimento de produtos com aplicação na área alimentar, farmacêutica e/ou cosmética.

Agradecimentos

Os autores agradecem à Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT, Portugal) e aos fundos nacionais FCT/MCTES (PIDDAC) pelo apoio financeiro ao CIMO (UIDB/00690/2020 e UIDP/00690/2020) e SusTEC (LA/P/0007/2021). o contrato de Lillian Barros através do contrato-programa institucional de emprego científico e do contrato de Sandrina A. Heleno (CECIND/03040/2017) através do contrato-programa individual de emprego científico. Este projeto recebeu financiamento da Empresa Comum das Indústrias de Base Bio (JU) ao abrigo da convenção de subvenção n.º 887917 BeonNAT. A JU recebe apoio do programa de pesquisa e inovação Horizon 2020 da União Europeia e do Bio Based Industries Consortium.

Referências:

- [1] Gonçalves, A.C.; Flores-Félix, J.D.; Coutinho, P.; Alves, G.; Silva, L.R. *Int. J. Mol. Sci.* **23** (2022) 3197.;
- [2] Raina, R.; Verma, P.K.; Peshin, R.; Kour, H. P. *Heliyon*, **5** (2019).