



XXVII ENCONTRO LUSO GALEGO DE QUÍMICA

22-24 NOVEMBRO 2023
PORTO, PORTUGAL

LIVRO DE RESUMOS



Colegio Oficial de
Químicos de Galicia



ASOCIACIÓN DE
QUÍMICOS DE GALICIA



SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE QUÍMICA

FICHA TÉCNICA

TÍTULO

Livro de Resumos do XXVII Encontro Luso-Galego de Química

EDITORES

Raquel P. Rocha, Joaquim L. Faria

EDITORES ASSOCIADOS

Cláudia G. Silva, Maria José Sampaio, O. Salomé G.P. Soares

EDIÇÃO

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

DATA

Novembro de 2023

TIRAGEM

50 exemplares

ISBN (versão impressa)

978 989 8124 40 1

ISBN (versão digital)

978 989 8124 39 5

DESIGN GRÁFICO

Joana Macedo

IMPRESSÃO

Efeitos Gráficos Unipessoal Lda

CATALOGAÇÃO RECOMENDADA

Livro de Resumos do XXVII Encontro Luso-Galego de Química
Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Porto, Portugal (2023)

Este livro de atas foi produzido a partir dos trabalhos submetidos diretamente pelos autores. Apenas foram introduzidas pequenas alterações de edição, o que não alterou o conteúdo científico. A versão final online foi estabelecida para o XXVII Encontro Luso-Galego de Química, de acordo com o modelo publicado. Os autores são responsáveis pelo conteúdo científico dos seus trabalhos.

© Sociedade Portuguesa de Química

Todos os direitos reservados. Nenhuma parte deste documento pode ser reproduzido de qualquer forma ou por qualquer meio sem o consentimento por escrito dos editores.

INFORMAÇÕES GERAIS

LOCAL DO ENCONTRO

O Encontro decorrerá no Centro de Congressos e Exposições da Fundação Dr. António Cupertino de Miranda, no Porto.

RECEPÇÃO

O acolhimento para levantamento da documentação do encontro e informações estará localizada na receção do Centro de Congressos e Exposições da Fundação Dr. António Cupertino de Miranda, no horário indicado no programa.

EQUIPAMENTO DE PROJEÇÃO

As salas das comunicações orais estão equipadas com computador (Microsoft Office) e sistema de projeção. Cada orador deverá transferir o ficheiro (em PowerPoint) da sua apresentação para o computador da sala pelo menos, no limite, na sessão anterior.

COMUNICAÇÕES ORAIS

As lições plenárias terão duração de 40 minutos, a que se segue um período de discussão não superior a 10 minutos. As comunicações orais terão duração de 10 minutos, seguidas de 5 minutos de discussão. Atendendo ao número elevado de comunicações orais, pede-se a todos os oradores que cumpram o tempo estipulado de forma a evitar atrasos no programa.

COMUNICAÇÕES EM PAINEL

As dimensões máximas dos painéis serão de 90 cm de largura x 120 cm de comprimento, aconselhando-se a dimensão A0 para o poster. Os posters deverão ser afixados apenas no dia em que decorrerá a sessão onde foram alocados, de preferência antes do início do programa científico do respetivo dia. Pede-se aos autores para estarem presentes junto dos painéis durante a sessão de discussão. Os posters deverão ser removidos no final do dia pelos autores da comunicação.

BANQUETE

O jantar do encontro será no dia 23 de novembro, pelas 21:00, nas Caves Cálem.

XXVII Encontro Luso-Galego de Química

QSUS14	Production of biodiesel from waste cooking oils and its purification using adsorption techniques with natural adsorbents	João Vitor Fabian
QSUS15	In-depth knowledge on raspberry-seeds derived biomolecules towards their future valorisation	Paloma Lopes
QSUS16	Development of a biodegradable and functional film from chestnut processing waste	Simão Silva
QSUS17	Soluciones sostenibles para la eliminación de colorantes textiles de efluentes acuosos	Iñaki Beceiro-Cillero
QSUS18	Gold recovery from the waste of integrated circuits using distinct leaching agents	Márcia A.D. Silva
QSUS19	Microparticles formulated with <i>Undaria pinnatifida</i> crude extracts obtained by pressurized hot water extraction	N. Flórez-Fernández

QUÍMICA TEÓRICA E MODELAÇÃO MOLECULAR | THEORETICAL CHEMISTRY AND MOLECULAR MODELING

QTMM1	Molecular dynamics simulations for the study of lysinated multiwalled carbon nanotubes as doxorubicin nanocarriers	Fábio G. Martins
QTMM2	The Drug to Target Journey: Development of a Reverse Virtual Screening protocol for protein target identification	Tatiana F. Vieira
QTMM3	Deciphering the Enigma of Snake Venom: Exploring PLA2 Dimerization for Improved Antivenom Development	Joana Ribeiro da Silva
QTMM4	How simple models in Monte Carlo simulations can complement and expand the knowledge of Biomolecule-Based Drug Delivery Systems	Sandra CC Nunes
QTMM5	Cyclodextrin complexes: computational insights into structure and recognition behavior for enhanced pharmaceutical and environmental applications	Tânia Cova
QTMM6	Aspartame and Inflammation: An In Silico Evaluation of Interference in the Land's Cycle and Cell Membrane Integrity	Isabelly Annunciato
QTMM7	Biological Implications of DEP: An In Silico Study of Molecular Interactions and Toxicity Associated with Organophosphates	Isabelly Annunciato
QTMM8	Computational Approaches for Recognition Mechanisms of Chiral Derivatives of Xanthenes on (S,S)-Whelk-O1	Rita Lima
QTMM9	New theoretical interpretations of the copper-doped lead apatite superconductor or semiconductor	Amanda Fernandes Gouveia
QTMM10	Dark and Bright Conformations of a Single-Benzene Fluorophore	Samuel Guieu
QTMM11	A novel manner of anchoring surface stability of In ₂ O ₃ polymorphs (rhombohedral and cubic): a fertile field for morphology control	Amanda Fernandes Gouveia

QUÍMICA VERDE | GREEN CHEMISTRY

QV1	GREENER Pharmaceuticals for more sustainable healthcare – This is the way!	Mafalda Sarraguça
QV2	Evaluating Subcritical Water Extraction for Red Algae Residue Valorization: Chemical Composition and Biological Activity	Esther Trigueros Andrés
QV3	Exploring novel solvents for enhanced conformational and colloidal stability of biopharmaceuticals	Ana S. C. Marques

Production of biodiesel from waste cooking oils and its purification using adsorption techniques with natural adsorbents

João Vitor Fabian^{1,2,3 *}, Miriam Domingues Guimarães^{1,2}, Camilla Groxko Smolich^{1,2}
Ticiane Sauer Pokriwieck³, Ana Queiroz^{1,2}, António E. Ribeiro^{1,2}, Paulo Brito^{1,2}

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

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

³Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Linha Santa Bárbara, 85601-970, Francisco Beltrão, Brasil

*joaofabian@alunos.utfpr.edu.br

The world's energy demands are steadily increasing each year, promoting the exploration of cleaner and more sustainable alternatives to classical fossil sources. In this context, biodiesel emerges as a promising candidate for replacing fossil diesel, making a significant contribution to carbon emissions reduction. One notable advantage lies in the ability to utilize waste cooking oils (WCO) as a feedstock for biodiesel production. This practice not only mitigates waste but also transforms a previously underutilized resource into a valuable source of renewable energy, thereby promoting sustainability and energy efficiency [1].

Currently, 95% of biodiesel production relies on first-hand feedstock due to its high conversion into fatty acid ethyl esters (FAEEs) or fatty acid methyl esters (FAMEs) [2]. However, this study introduces the utilization of Waste Cooking Oil (WCO) as a greener approach to biodiesel production. Biodiesel production can be achieved through alkaline catalyzed transesterification, with the aim of meeting the standards specified by EN 14214 at the end of its production process. Therefore, crude biodiesel obtained from the transesterification step needs to undergo glycerol purification in order to comply with the norm specification of a maximum free glycerin content of 0.02% (w/w). Hence, the present study seeks to produce and characterize activated carbons derived from walnut shells, and evaluate its use in the removal of glycerol from crude ethanolic biodiesel produced from WCO, a possible alternative to the traditional wet washing process, which results in the loss of between 0.2L to 10L of water per liter of biodiesel produced [3].

In this work, titration in triplicate was employed to determine the acid value of the oil, quantified as mg KOH/g of the sample, yielding a result of 0.8355 ± 0.0274 . This provided a preliminary assessment for the determination of the necessary alkaline catalyst percentage which would mitigate parallel saponification during the transesterification process. The reaction tests, executed in duplicate, included varying catalyst proportions of 0.5%, 0.6%, and 0.7% (w/w) relative to the processed oil. Gas chromatography (GC) was employed for the characterization of the produced biodiesel, revealing that a 0.5% (w/w) catalyst load was the optimal choice, providing a consistent average yield of 89.52% in FAEEs. Biodiesel production is currently conducted via the ethanol route with 1:7.5 oil/ethanol molar ratio, considering an excess in relation to the stoichiometric molar ratio 1:3 [4]. The research is also focused on the production of activated carbon materials, involving both chemical and physical activation techniques. Chemical activations will encompass the utilization of bases (KOH), acids (H_3PO_4), constituting a pivotal phase in enhancing the overall efficiency and sustainability of the biodiesel production process.

Acknowledgments

The authors are grateful to the Foundation for Science and Technology (FCT, Portugal) for financial support through national funds FCT/MCTES (PIDDAC) to CIMO (UIDB/00690/2020 and UIDP/00690/2020) and SusTEC (LA/P/0007/2021).

References

- [1] X. Ma et al., Energy Conversion and Management, 229 (2021) 113760.
- [2] S. Prasad et al., Bioresource Technology, 303 (2020) 122964.
- [3] M. Catarino et al., Chemical Engineering Journal, 386 (2020) 123930.
- [4] H. Hosseinzadeh-Bandbafha et al., Renewable and Sustainable Energy Reviews 161 (2022) 112411.