

XXVII ENCONTRO NACIONAL

Sociedade Portuguesa de Química

Braga, 14-16 julho 2021



Chemistry and Opportunities in a Global Society

Book of abstracts

14-16th July 2021

Building II

Campus of Gualtar

University of Minho

Title

Livro de resumos do XXVII Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química
Book of abstracts of the XXVII National Meeting of the Portuguese Chemical Society

Editors

Ana Paula Estevão

Luís Monteiro

Maria Manuela Raposo

Sílvia Pereira-Lima

Susana Costa

Edition

Sociedade Portuguesa de Química

Graphic design

Renato Gonçalves

Sílvia Pereira-Lima

Date

July 2021

ISBN

978-989-8124-33-3 (digital edition)

Recommended cataloging

Livro de resumos do XXVII Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química

Departamento de Química, Universidade do Minho, 2021 – 345 p.

ISBN 978-989-8124-33-3

This book was produced from the abstracts submitted directly by the authors, in accordance with the rules publicly disclosed in the event's announcements. Only small formatting changes were introduced that did not modify the scientific contents, which are the sole responsibility of the respective authors.

Meeting schedule

14th July (Wednesday)			
9h30	Opening ceremony Auditorium A		
10h15	PL1 - Ferreira da Silva Award Mário Nuno Berberan Santos (IST-UL), Auditorium A		
11h05	Coffee break / virtual posters		
11h35	Auditorium A Chair: I. Ismael	Auditorium B Chair: A. Silvestre	Auditorium C Chair: C. Silva
	KN1 Salette Reis - UP	KN3 Paula Ferreira - UM	KN5 Sérgio Seixas Melo - UC
12h05	OC1 Sónia Ventura - UA	OC4 Mª Manuel Marques - UNL	OC7 Filomena Barreiro - IPB
12h25	OC2 Licinia Justino - UC	OC5 Marta Correia-da-Silva - UP	OC9 Rosa Perestrelo - UMa
12h45	lunch		
14h30	PL2 Christine Keating (Penn State University, USA), Auditorium A		
15h20	Auditorium A Chair: C. Afonso	Auditorium B Chair: J. Rodrigues	Auditorium C Chair: P. Gois
	KN2 Eulália Pereira - UP	KN4 Tiago Rodrigues - UL	KN6 Lillian Barros - IPB
15h50	OC3 Manuel Souto - UA	OC6 Jaime Coelho - UL	OC8 Ana Seca - UA
16h10	O1 Elsa Gonçalves - Hovione	O5 Ana Gomes - UP	O9 Rafael Rippel - UNL
16h25	Coffee break / virtual posters		
16h55	Auditorium A Chair: M. A. Carvalho	Auditorium B Chair: J. C. Marcos	Auditorium C Chair: L. Monteiro
	O2 Igor Reva - UC	O6 Eva Monteiro - Bruker	O10 Joana Azevedo - UP
17h10	O3 Zhipeng Yu - UP	O7 Joana Martins - UNL	O8 Cláudia Braga - UL
17h25	O4 Luís Branco - UNL	O11 J. Valentine - UAlg	O12 Alexander Beliaev - Bial
17h40	Flash1-10 e 53	Flash11-21	Flash22-32
	Cátia Lopes Rui Machado João Nunes Krzysztof Biernacki Mariana Velho André Pinto Mariana Martins Joana Nunes Joana Lopes Iwona Biernacka Maria Carpena	Lara Fidalgo Fátima Paiva-Martins Raquel Gonçalves Flávia Magalhães Pedro Varandas Sónia Pinto Shirley Sancha Bruno Gonçalves Alexandra Borges Dina Maciel André Luz	Luís Lema Rui Sousa Juliana Pereira Maria Barros Solange Magalhães Ana Fernandes Nathalia Foureaux Ouissal Assila Hugo Salazar Thainara Viana Márcia Silva

15th July (Thursday)			
9h30	PL3 Christian Bochet (University of Fribourg, Switzerland), Auditorium A		
10h20	Auditorium A Chair: M. Berberan	Auditorium B Chair: J. Amaral	Auditorium C Chair: A. Ricardo
	KN7 Nuno Silva - UA	KN9 Goreti Sales - UC	KN11 Cláudia Lopes - UA
10h50	OC10 Elisabete Carreiro - UEV	OC13 Nuno Candeias - UA	OC16 Ana Lado Ribeiro - UP
11h10	Coffee break / virtual posters		
11h40	Chair: J. Faria Iberian Photocatalysis Association / White Book of Photocatalysis, Auditorium A		
12h00	PL4 Damià Barceló (Catalan Institute for Water Research, Spain), Auditorium A		
12h50	lunch		
14h30	PL5 Pierre Dixneuf (University of Rennes, France), Auditorium A		
15h20	Auditorium A Chair: F. Proença	Auditorium B Chair: A. Burke	Auditorium C Chair: N. Candeias
	KN8 Manuela Raposo - UM	KN12 Luísa Martins - IST-UL	KN10 Teresa Casimiro - UNL
15h50	OC11 Luís Viegas - UC	OC17 Ana Nunes - UNL	OC14 Carolina Marques - UEV
16h10	OC12 Mariana Fernandes - UTAD	OC18 Joana Leal - UAlg	OC15 Cândida Tomaz - UBI
16h30	O13 Ivo Martins - UMa	O17 Rafael Gomes - UL	O15 Marta Andrade - Hovione
16h45	O14 Sara Jorge - IST-UL	O18 Gianluca Utzeri - UC	O16 Beatriz Pires-Lima - UP
17h00	Coffee break / virtual posters		
17h30	DEBATE - Public perception of Science in a pandemic Moderator: Adriano Cerqueira Speakers: Miguel Castanho, Cecília Arraiano, David Marçal, Elsa Costa e Silva Auditorium A		
19h00	SPQ Meeting, Auditorium A / Zoom link https://us06web.zoom.us/j/89205764683?pwd=eUJlV0NlbnR1c0ZlVmlkUjQ5a1kzdz09 ID: 892 0576 4683 / access code: 357051		

16th July (Friday)			
9h30	PL6 Milo Shaffer (Imperial College London, UK), Auditorium A		
10h20	Auditorium A Chair: L. Cristiano	Auditorium B Chair: A. P. Estevão	Auditorium C Chair: R. Fausto
	KN13 Fátima Montemor - IST-UL	KN17 Mª Luz Sampaio - UNL	KN15 Paulo Almeida - UBI
10h50	OC19 Rui Pereira - UM	OC23 Fernanda Carvalho - IST-UL	OC21 Alice Carvalho - UM
11h10	Coffee break / virtual posters		
11h40	Auditorium A Chair: V. Bermudez	Auditorium B Chair: F. Carvalho	Auditorium C Chair: M. M. Silva
	KN14 Paulo Coelho - UTAD	KN18 Manuel Monte - UP	KN16 Cecília Arraiano - UNL
12h10	PL7 Tomás Torres (Universidad Autónoma de Madrid, Spain), Auditorium A		
13h00	lunch		
14h30	PL8 Pierre Braunstein (University of Strasbourg, France), Auditorium A		
15h20	Auditorium A Chair: A. Galvão	Auditorium B Chair: S. Pereira-Lima	Auditorium C Chair: M. J. Alves
	OC20 Helena Tomás - UMa	OC24 João Paulo André - UM	OC22 Susana Lopes - UC
15h40	O19 Nuno Basílio - UNL	O21 José Luís Araújo - UP	O20 Ricardo Lopes - UL
15h55	Flash33-42 Ana Ferreira Marlene Pacheco Rafaela Marques João Barbosa Ana Lima João Sarrato Roberto Aguado Rafael Castro Adriano Silva Inês Martins	Flash54-62 Marlene Costa Javier Echave Mikel Anibarro-Ortega Mónica Honrado Rosa Pérez-Gregório Luís Cruz Carlos Guerreiro Samara Silva Stephany Rezende	Flash43-52 Cátia Martins Catarina Cipriano Ana Francisca Silva André Campaniço Nuna Ramos Fernanda Carvalho Sofia Teixeira Rita Félix Elizabeth Lopes João Ravaço
	Coffee break / virtual posters		
17h30	Vicente de Seabra Medal Gonçalo Bernardes (UL), Auditorium A		
18h15	Closing ceremony Auditorium A		

Food and natural products

Extração de aloeresina B a partir de *Aloe vera* com recurso a solventes alternativos: Otimização do processo e avaliação de bioatividades

Añibarro-Ortega M,^a Pinela J,^a Ćirić A,^b Ferreira O,^a Molina AK,^a Lopes E,^c Soković M,^b Ferreira ICFR,^a Barros L^a

a) Centro de Investigação de Montanha (CIMO), Instituto Politécnico de Bragança, Campus de S.^{ta} Apolónia, 5300-253 Bragança, Portugal; b) Institute for Biological Research "Siniša Stanković" - National Institute of Republic of Serbia, University of Belgrade, Bulevar Despota Stefana 142, 11000 Belgrade, Serbia; c) aCourela do Alentejo, Garro Pinheiro de Baixo CCI3, 7350-422 Varche, Elvas, Portugal

Email: jpanela@ipb.pt

A aloeresina B é uma cromona encontrada em *Aloe* spp. com elevado potencial na indústria de cosméticos e alimentos dada a sua capacidade de modular a formação de melanina e os efeitos benéficos nos índices relacionados ao estado pré-diabético, incluindo síndrome metabólico.^{1,2} Portanto, dado o valor de mercado da aloeresina B, este estudo foi realizado com o objetivo de otimizar a sua extração a partir da epiderme da folha de *Aloe vera*, camada esta que corresponde a ~31% do peso total da folha e é normalmente descartada como subproduto.³ Para a otimização do processo de extração, o tempo (10–210 min), a temperatura (25–95 °C) e o solvente (0–100%, w/w) foram as variáveis independentes selecionadas e combinadas num desenho de composto central circunscrito de cinco níveis acoplado à metodologia de superfície de resposta. O solvente consistiu em misturas de água com etanol, propano-1,2-diol ou propano-1,2,3-triol (glicerol), dado o potencial para serem usados em diferentes áreas, incluindo alimentar, cosmética e farmacêutica. Os teores de aloeresina B nos 60 extratos foram quantificados por HPLC-DAD e usados como critério de resposta. Os modelos teóricos foram ajustados com sucesso aos dados experimentais, validados estatisticamente com base em valores de R² e R²_{adj} elevados e numa falta de ajuste não significativa e seguidamente usados para “navegar” o desenho experimental e obter as melhores condições de extração. Posteriormente, foi realizada uma análise dose-resposta da razão sólido/líquido nas condições ótimas previamente estabelecidas para cada sistema álcool-água, a qual evidenciou uma melhoria na eficiência de extração com o aumento da razão de 3 para 40 g/L. Esta análise também permitiu validar experimentalmente os três modelos preditivos. Considerando as quatro variáveis envolvidas na extração, foi possível concluir que os maiores teores de aloeresina B foram alcançados com o sistema binário de propano-1,2-diol, enquanto rendimentos de extração consideráveis também foram obtidos com água pura, um solvente preferível em muitas aplicações. Além disso, os extratos obtidos nas condições ótimas apresentaram capacidade de inibir a formação de substâncias reativas ao ácido tiobarbitúrico (TBARS), atividade antimicrobiana contra várias estirpes de bactérias e fungos relacionadas com a pele e alimentos e capacidade de inibir a atividade da enzima tirosinase. Este estudo permitiu obter as condições ótimas para a recuperação de aloeresina B a partir de um subproduto vegetal através de um processo de extração sustentável envolvendo solventes verdes e destacou também o potencial dos extratos para serem usados em formulações cosméticas de aplicação tópica.

Agradecimentos: Os autores agradecem à Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT) e fundos nacionais FCT/MCTES pelo apoio financeiro ao CIMO (UIDB/00690/2020). M. Añibarro-Ortega e A.K. Molina agradecem as bolsas (2020.06297.BD e 2020.06231.BD, respetivamente) à FCT e J. Pinela (CEECIND/01011/2018) e L. Barros agradecem os contratos no âmbito do contrato-programa de emprego científico. Trabalho financiado pelo Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional (FEDER) através do Programa Operacional Competitividade e Internacionalização (POCI) e por fundos nacionais através da FCT, no âmbito do Projeto POCI-01-0145-FEDER-030463: AllNat. Ao programa FEDER-Interreg Espanha-Portugal pelo apoio financeiro através do projeto TRANSCoLAB 0612_TRANS_CO_LAB_2_P. Trabalho apoiado pelo Ministério da Educação, Ciência e Desenvolvimento Tecnológico da República da Sérvia (451-03-68/2020-14/200007). À empresa “aCourela do Alentejo” pelo material vegetal.

References:

1. Wahedi, H. M. *et al. Phytomedicine* **2017**, *28*, 19.
2. Lynch, B.; Simon, R.; Roberts, A. *Regul. Toxicol. Pharmacol.* **2011**, *61*, 161.
3. Añibarro-Ortega, M. *et al. Antioxidants* **2019**, *8*, 444.