



XXIV Encontro Luso Galego de

QUÍMICA

21-23 novembro de 2018
Porto - Portugal



LIVRO DE RESUMOS



SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA



Colegio Oficial de
Químicos de Galicia



XXIV Encontro Luso Galego de

QUÍMICA

21 A 23 NOVEMBRO 2018

PORTO - PORTUGAL



SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA



**Colegio Oficial de
Químicos de Galicia**

TÍTULO

Livro de Resumos do XXIV Encontro Luso-Galego de Química

AUTORES

Victor Freitas, Joana Oliveira

EDIÇÃO

Sociedade Portuguesa de Química

Av. Da República, 45 – 3º Esq

1050-187 Lisboa – Portugal

DATA

Novembro de 2018

TIRAGEM

500 Exemplares

ISBN

978-989-8124-24-1

DESIGN GRÁFICO

Joana Macedo

CATALOGAÇÃO RECOMENDADA

Livro de Resumos do XXIV Encontro Luso-Galego de Química

Faculdade de Ciências, U. Porto, 2018 – 500 p.

ISBN 978-989-8124-24-1

Química – Congressos

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 XXIV 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 reproduzida de qualquer forma ou por qualquer meio sem o consentimento por escrito dos editores.

ÍNDICE

9 PROGRAMA CIENTÍFICO

- 12 Lições Plenárias
- 13 Comunicações Orais
- 22 Sessão de Posters

31 RESUMOS DAS LIÇÕES PLENÁRIAS

39 RESUMOS DAS COMUNICAÇÕES POR ÁREA

- 41 (BB) Bioquímica e Biotecnologia
- 69 (CAT) Catálise e Fotocatálise
- 94 (EEQ) Educação e Ensino de Química
- 98 (NN) Nanoquímica e Nanotecnologia
- 126 (QAMA) Química Agro-Mar-Alimentar
- 223 (QA) Química Analítica
- 261 (QP) Química dos Polímeros
- 267 (QAMB) Química e Ambiente
- 324 (QS) Química e Saúde
- 380 (QSOC) Química e Sociedade
- 382 (QF) Química Física
- 407 (QIE) Química Industrial e Engenharia
- 418 (QI) Química Inorgânica
- 438 (QO) Química Orgânica
- 466 (QSUS) Química Sustentável
- 477 (QT) Química Teórica e Modelação Molecular
- 483 (SQ) Segurança Química

PROGRAMA CIENTÍFICO

21 NOVEMBRO 2018 | QUARTA-FEIRA

9:00 - 11:00	ENTREGA DA DOCUMENTAÇÃO			
11:00 - 11:30	SESSÃO DE ABERTURA			
11:30 - 12:30	PLENÁRIA DE ABERTURA Auditório Ferreira da Silva (AFS) Stéphane Quideau			
12:30 - 14:00	ALMOÇO			
14:00 - 15:00	QAMA 1	QO 1	QA 1	QAMB 1
	QAMA 2	QO 2	QA 2	QAMB 2
	QAMA 3	QO 3	QA 3	QAMB 3
	QAMA 4	QO 4	QSOC 1	QAMB 4
Pausa (5 min)				
15:05 - 16:05	QAMA 5	QO 5	QA 5	QAMB 5
	QAMA 6	QO 6	QA 6	QAMB 6
	QAMA 7	QO 7	QA 7	QAMB 7
	QAMA 8	QO 8	QA 8	QAMB 8
16:05 - 17:00	PAUSA CAFÉ / SESSÃO DE POSTERS			
17:00 - 17:45	PLENÁRIA 1 (AFS) Tomás Cordero Alcántara			
17:45 - 18:30	QAMA 9	QO 9	CAT 1	QAMB 9
	QAMA 10	QO 10	CAT 2	QAMB 10
	QAMA 11	QO 11	CAT 3	QAMB 11
Pausa (5 min)				
19:00 - 19:45	QAMA 12	SQ 1	CAT 4	QAMB 12
	QAMA 13	QP 1	CAT 5	QAMB 13
	QAMA 14	CAT 10	CAT 6	QAMB 14
19:45	PORTO DE HONRA			

PROGRAMA CIENTÍFICO

22 NOVEMBRO 2018 | QUINTA-FEIRA

9:00 - 10:00	QAMA 15	QS 1	QT 1
	QAMA 16	QS 2	QT 2
	QAMA 17	QS 3	QT 3
	QAMA 18	QS 4	QT 4
Pausa (5 min)			
10:05 - 11:15	QAMA 19	CAT 7	QS 5
	QAMA 20	CAT 8	QS 6
	QAMA 21	CAT 9	QS 7
	QAMA 22	CAT 11	QS 8
	QAMA 23	QS 56	QS 9
11:15-11:45	PAUSA CAFÉ/ SESSÃO DE POSTERS		
11:45-12:30	PLENÁRIA 2 (AFS) Carlos Lodeiro Espinõ		
12:30-14:00	ALMOÇO		
14:00 - 15:00	QAMA 24	CAT 12	QAMB 15
	QAMA 25	CAT 13	QAMB 16
	QAMA 26	CAT 14	QAMB 17
	QAMA 27	QA4	QAMB 18
Pausa (5 min)			
15:05 - 16:05	QS 10	QSOC 2	QAMB 19
	QS 11	QA 9	QAMB 20
	QS 12	QA 10	QAMB 21
	QS 13	QA 11	QAMB 22
16:05-17:00	PAUSA CAFÉ / SESSÃO DE POSTERS		
17:00-17:45	PLENÁRIA 3 (AFS) Pilar Goya Laza		
17:45-19:00	QS 14	QA 12	QAMB 23
	QS 15	QA 13	QAMB 24
	QS 16	EEQ 1	QAMB 25
	QS 17	EEQ 2	QSUS 7
20:00	JANTAR DO ENCONTRO		

PROGRAMA CIENTÍFICO

23 NOVEMBRO 2018 SEXTA-FEIRA				
9:00 - 10:00	QAMA 28	QS 18	QF 1	
	QAMA 29	QS 19	QF 2	
	QAMA 30	QS 20	QF 3	
	QAMA 31	QS 21	QF 4	
Pausa (5 min)				
10:05 - 11:05	BB 1	QS 22	QF 5	
	BB 2	QS 23	QF 6	
	BB 3	QS 24	QF 7	
	BB 4	QS 25	QF 8	
11:05-11:45	PAUSA CAFÉ/ SESSÃO DE POSTERS			
11:45-12:30	PLENÁRIA 4 (AFS) Manuel António Coimbra (AFS)			
12:30-14:00	ALMOÇO			
14:00-15:30	QAMA 32	BB 5	NN 1	QSUS 1
	QAMA 33	BB 6	NN 2	QSUS 2
	QAMA 34	BB 7	NN 3	QSUS 3
	QAMA 35	BB 8	NN 4	QSUS 4
	QI 1	QAMA 36	NN 5	BB 9
	QI 2	QAMA 37	NN 6	QSUS 5
15:30-16:00	PAUSA CAFÉ/ SESSÃO DE POSTERS			
16:00-17:30	QI 3	QAMA 38	NN 7	QSUS 6
	QI 4	QAMA 39	NN 8	QIE 1
	QI 5	BB 10	NN 9	QIE 2
	QI 6	BB 11	NN 10	QIE 3
	QI 7	BB 12	NN 11	QIE 4
	QI 8	BB 13	NN 12	QI9
17:30	SESSÃO DE ENCERRAMENTO			

COMUNICAÇÕES ORAIS

21 NOVEMBRO 2018 - Quarta-feira

17:45 - 18:30

SALA 4 FC6 (1.42)

QO 9	Novel porphyrin-flavone conjugates: synthesis and photophysical characterization , Mariana Mesquita
QO 10	New routes for the synthesis of marine xanthenes with antimicrobial activity , Daniela Loureiro
QO 11	Bioguided study in the search for natural antifungal components in the Brazilian Biomas , Marcelo Silva

19:00 - 19:45

SALA 1 Auditório Ferreira da Silva

QAMA 12	Recuperação otimizada de antocianinas de Prunus spinosa L. e Ficus carica L. para aplicação como corante alimentar , Carla Pereira
QAMA 13	Optimized Acetonitrile Based-Extraction for Determination of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Cooked Muscle Foods , Marta da Silva
QAMA 14	In-house validation method for the determination of 24 pharmaceuticals in clams using QuEChERS-LC-MS/MS , Cristina Almeida

SALA 2 Auditório FC6 (0.29)

QAMB 12	Viability of the conversion of leachate effluents, from a mechanical biological treatment plant for municipal solid waste, to fertilizers , Jonathan Cardoso
QAMB 13	Simultaneous removal of sulfamethoxazole and methyl paraben by electro-Fenton treatment , Antón Puga Pazo
QAMB 14	Monitoring of several chiral drugs in the Douro river estuary by LC-MS/MS , Maria Coelho

SALA 3 FC6 (1.37)

CAT 4	Development of heterogeneous nanostructured catalysts for biodiesel production , Catarina Lino
CAT 5	Waste oils valorization through biodiesel synthesis using [HMIM]HSO₄ ionic liquid as catalyst , Paulo de Brito
CAT 6	Kinetic study of the esterification process catalyzed by ionic liquids for fatty acid methyl esters production , Cristiana Meireles

SALA 4 FC6 (1.42)

SQ 1	Evaluación de la Exposición a Contaminantes Químicos en el Tratamiento de Residuos Vegetales , Eugénio Muñoz Camacho
QP 1	Thermal properties and molecular interactions of alginate/gelatin hydrogel microparticles , Nadezhda Pilipenko
CAT 10	Redução de bromato em água na presença de catalisadores metálicos suportados em nanotubos de carbono modificados , Ólivia Salom Soares

Kinetic study of the esterification process catalyzed by ionic liquids for fatty acid methyl esters production

C. Meireles¹, A. Queiroz¹, A. Ribeiro¹, P. Brito^{1*}

¹Mountain Research Center (CIMO), Polytechnic Institute of Bragança, Campus Santa Apolónia, 5300-253 Bragança, Portugal.

*paulo@ipb.pt

Due to the massive use of energy from non-renewable sources, as well as to environmental problems, it is important to find green alternatives to energy production. In this context, biodiesel arises as a possible diesel substitute which can be produced using basic or acid catalysts. Despite these traditional catalysts allow high production yields, problems related to its use and the environmental impacts associated, result in the need to search for more sustainable alternatives. Ionic liquids (ILs), used as possible catalysts, represent an interesting alternative because they can be recovered and reused, being environmentally friendly.

The kinetics of the esterification of free fatty acids (FFA) using oleic acid and methanol, and 1-butyl-3-methylimidazolium methyl sulfate, [BMIM][MeSO₄], IL as catalyst is presented. All kinetics measurements were carried out for 8 hours, with a catalyst quantity of 10% w/w, and a molar ratio oleic acid/methanol of 1:10, using four different reaction temperatures (60, 80, 100 and 110°C), under stirring, temperature control and reflux. Throughout the reaction, and at predetermined times (0, 15, 30, 60, 90, 120, 180, 240, 300, 360, 420 and 480 min), 1 mL of sample was collected from the reaction vessel. The acidity value, expressed in mg KOH/g biodiesel, was determined immediately after the sampling using the experimental procedure according to European Standard EN 14104 [1]. The conversion of oleic acid, in percentage, was estimated by comparing the initial and final acidity values. It was considered for the calculation of the initial acidity value, the sample collected at time 0 min. The integral method was applied considering 0th, 1st, 2nd and 3rd order kinetics relating to oleic acid, for all temperatures. Therefore, the coefficients of determination (R²) were compared and the order of reaction was selected taking into account the highest value attained. Finally, the Arrhenius theory was used to predict the activation energy value (see Fig. 1).

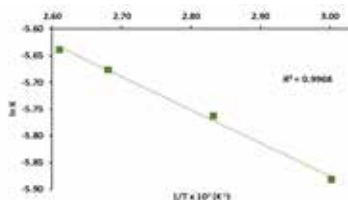


Fig. 1. Arrhenius plot of the rate constant ($\ln k$) versus the inverse of temperature ($1/T \times 10^3$) for the esterification of oleic acid with methanol catalyzed by [BMIM][MeSO₄] ionic liquid.

The results showed that the coefficient of determination ($R^2=0.998$) was obtained considering a 2nd order kinetics for all temperatures. Therefore, the activation energy (E_a) and the pre-exponential factor (A) were predicted assuming the kinetic order referred above. The activation energy (E_a) was determined as 5.16 kJ/mol and the pre-exponential factor (A) as 0.0624 L².mol⁻¹.min⁻¹. The relative low value found for the activation energy, indicates that [BMIM][MeSO₄] IL may be a promising catalyst for this type of reactions, showing a relative low sensitivity to temperature changes for the studied temperature range.

REFERENCES:

- [1] European Committee for Standardization. EN 14104: Fat and oil derivatives-Fatty Acid Methyl Esters (FAME) - Determination of acid value, 3 (2003) 1–14.