



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			

SESSÃO DE POSTERS

21 NOVEMBRO 2018 - Quarta-feira

SESSÃO I

QUÍMICA ORGÂNICA (QO)
QUÍMICA ANALÍTICA (QA)
QUÍMICA AMBIENTAL (QAMB)
QUÍMICA AGRO-MAR-ALIMENTAR (QAMA)
CATÁLISE E FOTOCATÁLISE (CAT)
SEGURANÇA QUÍMICA (SQ)
QUÍMICA DOS POLÍMEROS (QP)

22 NOVEMBRO 2018 - Quinta-feira

SESSÃO II

QUÍMICA E SAÚDE (QS)
QUÍMICA AGRO-MAR-ALIMENTAR (QAMA)
QUÍMICA AMBIENTAL (QAMB)
QUÍMICA ANALÍTICA (QA)
QUÍMICA TEÓRICA E MODELAÇÃO MOLECULAR (QT)

23 NOVEMBRO 2018 - Sexta-feira

SESSÃO III

BIOQUÍMICA E BIOTECNOLOGIA (BB)
EDUCAÇÃO E ENSINO DA QUÍMICA (EEQ)
NANOQUÍMICA E NANOTECNOLOGIA (NN)
QUÍMICA INDUSTRIAL E ENGENHARIA (QIE)
QUÍMICA INORGÂNICA (QI)
QUÍMICA SUSTENTÁVEL (QSUS)
QUÍMICA-FÍSICA (QF)

CAT 18	Materiales de carbono derivados de biomasa implicados en la síntesis de quinoxalinas. Consideraciones mecanísticas, María Elena Mayoral
CAT 19	Overview on Calcium diglyceroxide Biodiesel Catalyst, Ana Paula Dias
CAT 20	Acidic waste cooking oil valorization by biodiesel synthesis catalyzed by hydrogen sulfate 1-butyl-3-methylimidazolium, Ana Caroline Baú
CAT 21	Photoinduced water splitting with a Mn(III) supramolecular box, Lara Rouco Méndez
CAT 22	Optimization and kinetic study of esterification reaction of oleic acid using [HMIM]HSO ₄ as catalyst, Paulo Miguel Pereira de Brito
CAT 23	Synthesis, Characterization of TiO ₂ modified by (P, Mo) (P, W) and (Si, W) co-doping and its visible light photodegradation, Abderrahim El Mragui
CAT 24	NiCeAl-LDH/g-C ₃ N ₄ as photocatalyst for light-driven hydrogen production, Hanane Boumeriamé
CAT 25	Materiales híbridos de carbono/ZnO en la síntesis verde de heterociclos nitrogenados, María Elena Mayoral

SEGURANÇA QUÍMICA

SQ 2	Correlación entre accidentabilidad y economía en el sector de la construcción y sus efectos en plantas químicas, Eugenio Muñoz Camacho
------	--

QUÍMICA DOS POLÍMEROS

QP 2	Study of polymer additives migration on coated wires, Sandra Cristina de Matos
QP 3	Micro-structured Fluorescent Powders for Detecting Latent Fingerprints on Different Types of Surfaces, Hélio Lopes Barros
QP 4	Selective capture of beta-pinene by molecularly imprinted polymers: freundlich isotherms obtained by gc-ms, Humberto Eduardo Ferreira
QP 5	Análise de Componentes Principais aplicada ao estudo da oxipropilação do resíduo da semente da Araucaria angustifolia, Stephany Cunha de Rezende
QP 6	Freundlich isotherms: development of calculation models to determine adsorption of beta-pinene-minus from liquid solutions, Humberto Eduardo de Carvalho Santos Ferreira

22 NOVEMBRO 2018 - Quinta-feira

QUÍMICA E SAÚDE

QS 26	Bacterial sensitivity metal ion in aqueous solution by microcalorimetric techniques, José Luis Soto
QS 27	Chemical and microbiological characterization of Serra da Estrela cheese: A traditional Portuguese dairy product, Luísa Maria Fontes
QS 28	Quantification of Bisphenol A in human saliva by HPLC-FD, Virgínia Maria Ferreira Gonçalves
QS 29	Síntese e avaliação do potencial de uma cianina escurilica derivada da indolenina como sonda para deteção da BSA, Jorge Daniel Marques Machado
QS 30	Thermal properties of peloids using mineral water from galicia, José Luis Soto
QS 31	Bisphosphonate-Based Materials: Development of a 3-in-1 Multidelivery System for Osteoporosis Treatment, Jéssica Maria da Silva Barbosa
QS 32	Breast cancer and prostate cancer cell lines as target of benzophenones: in vitro assays, Djenisa Rocha
QS 33	D-Pinitol [(1S,2S,4S,5R)-6-metoxiciclohexano-1,2,3,4,5-pentol] de Mimosa caesalpinifolia para tratamento preventivo de diabetes mellitus, Marcelo José Dias Silva
QS 34	Valorisation of scabiosa stellata L.: a medicinal plant that grows wild in algeria, Diana Pinto
QS 35	Estudio de la actividad antitumoral de complejos de vanadio con ligandos hidrazona derivados de pyridoxal, Lucia Mato López
QS 36	Prostate cancer: antitumor effect of chalcones on androgen-dependent and androgen-independent prostate cancer cell lines, Bruno Miguel Guedes Horta
QS 37	A new strategy against malaria – antimalarial ionic liquids derived from aminoquinolines and fatty acids, Ana Teresa Teixeira da Silva
QS 38	Envisioning bladder cancer in liquid biopsies by high resolution mass spectrometry, Joana Cordeiro
QS 39	Phytochemical analysis and anti-aging activities of compounds from juniperus brevifolia bark, Ana Maria da Seca
QS 40	Especiación de complejos de vanadio(v) con ligandos hidrazona derivados de 2,6-diformil-4-metilfenol y estudio de su interacción con el adn, Lucia Mato López
QS 41	Pinpointing protein differences between chromophobe renal cell carcinoma and renal oncocytoma, Susana Jorge
QS 42	Antioxidant activity of chalcones related to the scavenging of hypochlorous acid, Thaise Martins
QS 43	Disposable electrochemical biosensors for early diagnosis of chronic kidney disease, Marta Neves
QS 44	Structure-based virtual screening approach to identify alpha-glucosidase inhibitors, Luísa Amaral
QS 45	Design and development of a IPAD device for magnesium determination in saliva, Juliana Isabel Aguiar
QS 46	Novel 16E-arylidene-5a,6a-epoxydehydroepiandrosterone derivatives: synthesis and cytotoxicity evaluation, Vanessa Sofia Figueiredo de Brito
QS 47	Unraveling the splicing events underlying nasopharyngeal carcinoma progression by label free quantitative mass spectrometry analysis, Luis André Carvalho

Optimization and kinetic study of esterification reaction of oleic acid using [HMIM]HSO₄ as catalyst

Paulo Brito^{1,*}, Fernanda F. Roman¹, Ana Queiroz¹, António Ribeiro¹

¹Mountain Research Center (CIMO), Polytechnic Institute of Bragança, Campus de Santa Apolónia, 5300-253 Bragança, Portugal - *paulo@ipb.pt

Biodiesel is a promising fuel, since its similarity to petrodiesel allows the application in regular diesel engines without major changes, while still promoting a reduction in environmental impacts caused by fossil diesel [1]. Meanwhile, the employment of high quality feedstock, for instance the usual edible oils, has disadvantages, such as competition with the food market. The replacement of those oils by waste cooking oils (WCO) brings major advantages, amongst them, the reduction of the costs associated to the feedstock and the value added to a material usually considered as waste [2].

The current work, proposes an optimization study using a Response Surface Methodology (RSM), focusing on two responses: (i) the conversion of oleic acid (OA), used as a model compound to simulate the FFAs present in the WCO, estimated on the acid value drop between initial OA and the biodiesel samples produced, determined according to EN 14104 [3] and (ii) the FAME content, measured according to EN 14103 [4]. The chosen design was Box-Behnken Design (BBD), with 4 variables (time, temperature, molar ratio methanol/oleic acid, and catalyst dosage) and 3 levels, leading to 27 experimental runs. The optimization was followed by a kinetics study, where time, molar ratio and catalyst dosage remained constant and set to optimal conditions, and the temperature was varied from 70 to 110°C. The acid value of the samples collected throughout the reaction was measured, and the conversion was calculated, allowing the establishment of the reaction evolution with time, which was used to predict the respective activation energy and the pre-exponential factor, according to Arrhenius theory.

Table 1 presents the optimal conditions estimated for each response and Fig. 1 shows the evolution of the OA conversion for each temperature. As OA was the limiting reactant, the reaction order was predicted using the integral method. The experimental results were best described by a third-order reaction model. The activation energy was estimated as 6.8 kJ/mol and the pre-exponential factor as 0.0765 L²·mol⁻²·min⁻¹, with a coefficient of determination of R²= 0.965.

Table 1. Optimal conditions estimated by the RSM design.

Variable	Responses	
	Conversion of OA	FAME content
Time (h)	8	8
Temperature (°C)	110	110
Molar ratio (mol/mol)	15:1	14:1
Catalyst dosage (wt%)	15	13.5
Optimal value	95%	90%

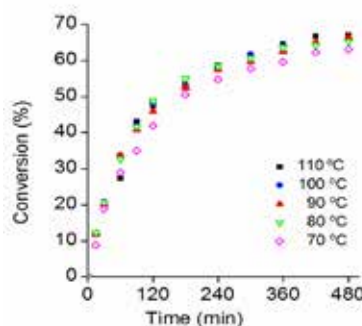


Fig.1. Conversion evolution with reaction time for each temperature

REFERENCES:

- [1] A.E. Atabani, A.S. Silitonga, I.A. Badruddin, T.M.I. Mahlia, H.H. Masjuki, S. Mekhilef, Renewable and Sustainable Energy Reviews, 16 (2012) 2070.
- [2] Biodiesel: Feedstocks, Production and Applications, Z. Fang (Ed.), InTech, 2016.
- [3] European Committee for Standardization. EN 14104: Fatty Acid Methyl Esters (FAME) - Determination of acid value (2003) 1.
- [4] European Committee for Standardization. EN-14103: Fatty Acid Methyl Esters (FAME) - Determination of ester and linolenic acid methyl ester contents (2003) 1.