



# 10º Encontro Nacional de Cromatografia

Bragança 2017 – 4 a 6 de dezembro

**Abstracts book / Livro de resumos**



SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA



INSTITUTO POLITÉCNICO DE BRAGANÇA Centro de Investigação de Montanha

COM O ALTO PATROCÍNIO DE SUA EXCELÊNCIA



*O Presidente da República*

## Title

10th Chromatography Meeting

## Título

10º Encontro de Cromatografia

## Authors / Autores

António M. Peres (Instituto Politécnico de Bragança, Portugal)

Lillian Barros (Instituto Politécnico de Bragança, Portugal)

Luís G. Dias (Instituto Politécnico de Bragança, Portugal)

Isabel C.F.R. Ferreira (Instituto Politécnico de Bragança, Portugal)

## Edition / Edição

Instituto Politécnico de Bragança · 2017

5300-253 Bragança · Portugal

Tel. (+351) 273 303 200 · Fax (+351) 273 325 405

<http://www.ipb.pt>

## Imaging services / Serviços de imagem

Atilano Suarez (Instituto Politécnico de Bragança, Portugal)

## URL

<http://hdl.handle.net/10198/8896>

## ISBN

978-972-745-234-7



## Organizing committee / Comissão Organizadora

Isabel C.F.R. Ferreira (Instituto Politécnico de Bragança)

José Manuel F. Nogueira (Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa)

Anabela Martins (Instituto Politécnico de Bragança)

António Peres (Instituto Politécnico de Bragança)

Cidália Lino (Instituto Politécnico de Bragança)

Helder Gomes (Instituto Politécnico de Bragança)

Joana Amaral (Instituto Politécnico de Bragança)

João Barreira (Instituto Politécnico de Bragança)

Jorge Sá Morais (Instituto Politécnico de Bragança)

Lillian Barros (Instituto Politécnico de Bragança)

Luís Dias (Instituto Politécnico de Bragança)

Luís Pais (Instituto Politécnico de Bragança)

M. Filomena Barreiro (Instituto Politécnico de Bragança)

Miguel Vilas Boas (Instituto Politécnico de Bragança)

Sandrina A. Heleno (Instituto Politécnico de Bragança)

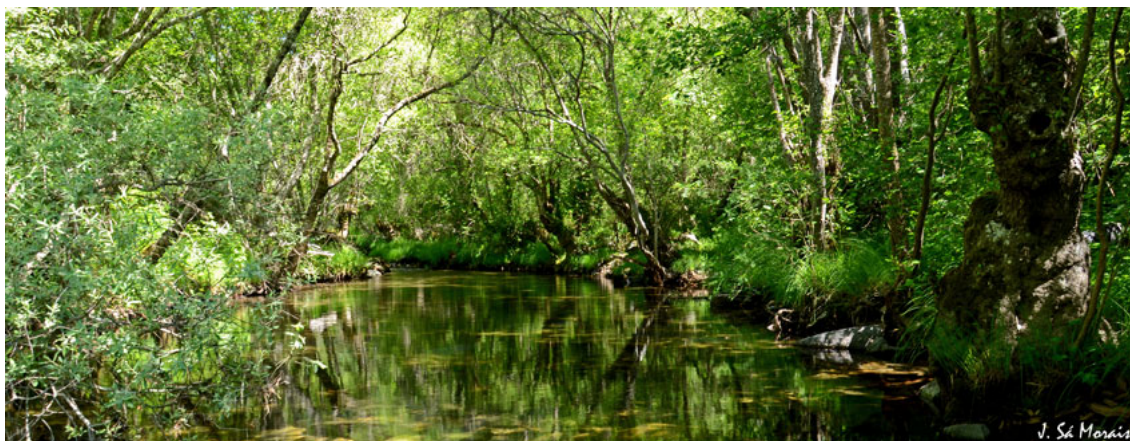
Cristina Campos (Secretariado - Sociedade Portuguesa de Química)

Leonardo Mendes (Secretariado - Sociedade Portuguesa de Química)



## Scientific committee / Comissão Científica

Alírio Rodrigues (Universidade do Porto)  
Ana Costa Freitas (Universidade de Évora)  
Anabela Romano (Universidade do Algarve)  
Armando Venâncio (Universidade do Minho)  
Carlos Cavaleiro (Universidade de Coimbra )  
Cristina Delerue Matos (Instituto Politécnico do Porto)  
Elisabete Lima (Universidade dos Açores)  
Fernando Nunes (Universidade de Trás-os-Montes)  
Helena Soares Costa (Instituto Nacional de Saúde Dr. Ricardo Jorge)  
Isabel C.F.R. Ferreira (Instituto Politécnico de Bragança)  
Ivonne Delgadillo (Universidade de Aveiro)  
João Carlos Marcos (Universidade do Minho)  
João Queiroz (Universidade da Beira Interior)  
José António Rodrigues (Universidade do Porto)  
José Câmara (Universidade da Madeira)  
José Manuel F. Nogueira (Universidade de Lisboa)  
M. Beatriz Oliveira (Universidade do Porto)  
Manuel António Coimbra (Universidade de Aveiro)  
Manuela Pintado (Universidade Católica)  
Marcela Segundo (Universidade do Porto)  
Marco Gomes da Silva (Universidade Nova de Lisboa)  
Maria Rosário Bronze (Universidade de Lisboa)  
Nuno Mateus (Universidade do Porto)  
Raquel Aires Barros (Universidade de Lisboa)  
Sílvia M. Rocha (Universidade de Aveiro)



## Program / Programa

Time	December 4	
8:00-9:00		• Registration
9:00-10:00		• Opening session in <i>Auditorium Dionísio Gonçalves</i>
<b>Moderator / Moderador - Auditorium Dionísio Gonçalves</b> <b>Isabel C.F.R. Ferreira</b> ( <i>Instituto Politécnico de Bragança</i> )		
10:00-11:00	PL-01	<b>In-tube SPME from open tubular column (in-tube SPME-LC) to directly coupled to mass spectrometry</b> <b>Maria Eugênia Costa Queiroz</b> <i>Universidade de São Paulo, Brasil</i>
11:00-11:30		• Coffee Break and panel session
<b>Moderator / Moderador - Auditorium Dionísio Gonçalves</b> <b>Sílvia M. Rocha</b> ( <i>Universidade de Aveiro</i> )		
11:30-12:00	IC-01	<b>Different Strategies Based on Micro(extraction) Followed by GC-MS/MS and LC-MS/MS for the Determination of Personal Care Products in Cosmetics and Environmental Samples</b> <b>Maria Llompert</b> <i>University of Santiago de Compostela, Espanha</i>
12:00-12:30	EC-01	<b>LCMS Technologies: Introducing the Orbitrap for Ultrahigh Resolution Exact Mass and Unequivocal ID</b> <b>Daniel Ettlin</b> <i>Thermo Unicam Sistemas Analíticos</i>
12:30-14:30		• Lunch
<b>Moderator / Moderador - Auditorium Dionísio Gonçalves</b> <b>Nuno Mateus</b> ( <i>Universidade do Porto</i> )		
14:30-15:00	IC-02	<b>Back to Basics: Considerations in eco-user-friendly/cost-effective micro-extraction techniques</b> <b>José Nogueira</b> <i>Universidade de Lisboa, Portugal</i>
<b>15:00-16:30</b>	<b>Oral session 1A / Sessão Oral 1A</b>	
	OC-01	<b>A multiresidue targeting approach for pesticide detection in olive oil: the role of dual-layer solid-phase extraction based on molecular imprinting technology</b> <b>Raquel Garcia</b>
	OC-02	<b>New brush-type chiral stationary phases based on xanthone derivatives for liquid chromatography</b> <b>Carla Fernandes</b>
	OC-03	<b>Chromatographic techniques to assess the profile of biomolecules in different mycorrhizal mushroom species</b> <b>Filipa Reis</b>
	OC-04	<b>Multicolumn based liquid chromatography processes for the separation of nadolol racemates</b> <b>António Ribeiro</b>
	OC-05	<b>An expanded bed chromatography approach for improving human mesenchymal stem cells purification</b> <b>Ricardo Silva</b>

OC-06 [Chromatographic analysis of biological samples using monolithic columns](#)  
**Marcela Segundo**

**Moderator / Moderador - Auditorium B**

**Marco Gomes da Silva** (Universidade Nova de Lisboa)

**15:00-16:30**

**Oral session 1B / Sessão Oral 1B**

- OC-07 [Avaliação da qualidade do ar em espaços de um edifício de ciências](#)  
**Sara Santos**  
[Engineered polymer particles for the valorization of phenolic compounds present in mixtures obtained through supercritical extraction](#)
- OC-08 [Thermostability studies of oil-soluble cyanidin-3-glucoside dyes](#)  
**Catarina Gomes**
- OC-09 [Adsorption equilibrium and kinetics of CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> and N<sub>2</sub> on zeolite BETA with different cations and SiO<sub>2</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ratio](#)  
**Adriano Henrique**
- OC-10 [Seawater degradation studies of gallic acid persulfate, a promising synthetic antifouling agent](#)  
**Cátia Vilas Boas**
- OC-11 [BeerOmics: how can advanced gas chromatography help to understand beer aroma properties?](#)  
**Cátia Martins**

16:30-17:00

- Coffee Break + Poster session

**Moderator / Moderador - Auditorium Dionísio Gonçalves**

**José Manuel F. Nogueira** (Universidade de Lisboa)

[Nexera UC Online SFE-SFC-MS System](#)

17:00-17:30

- EC-02 **José Manuel Macias**  
*Izasa Scientific*

**17:30-18:00**

**Oral session II / Sessão Oral II**

- OC-13 [Phenolic composition, antioxidant and biological activities of Portuguese vine shoot from \*Touriga Nacional\* and \*Tinta Roriz\* varieties](#)  
**Manuela Moreira**
- OC-14 [Caracterização química e bioatividades de \*Hibiscus sabdariffa\* L.](#)  
**Inès Jabeur**

19:30

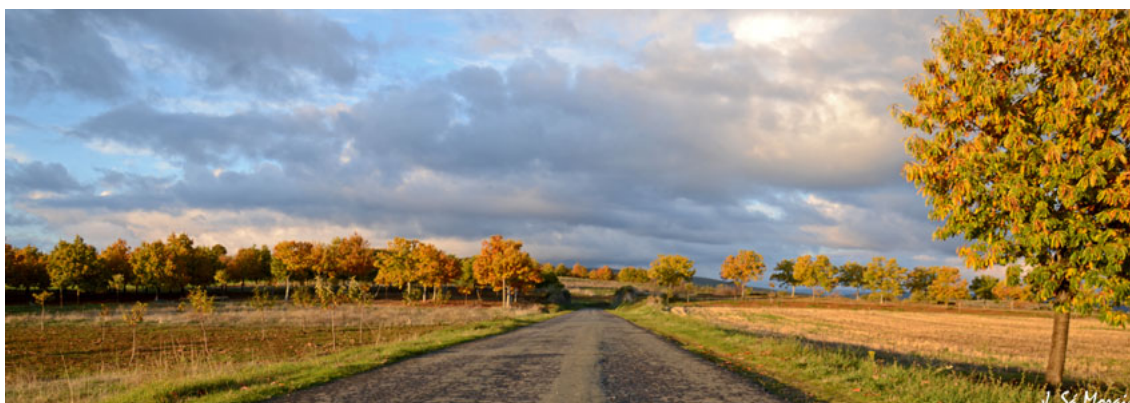
- Alheira Honor / Alheira Honra



Time	December 5
<b>Moderator / Moderador - Auditorium Dionísio Gonçalves</b> <b>Marcela Segundo</b> (Universidade do Porto)	
9:00-10:00	PL-02 <b>Green Foodomics: new strategies towards the discovery of functional food ingredients with biological activity</b> <b>Elena Ibanez</b> Institute of Food Science Research – CIAL, Espanha
10:00-10:30	IC-03 <b>Multicolumn Continuous Countercurrent Chromatography for Downstream Processing of Biopharmaceuticals</b> <b>Paulo Mota</b> University Nova de Lisboa, Portugal
10:30-11:00	• Coffee Break + Poster session
<b>Moderator / Moderador - Auditorium Dionísio Gonçalves</b> <b>M. Beatriz Oliveira</b> (Universidade do Porto)	
<b>11:00-12:30</b>	<b>Oral session IIIA / Sessão Oral IIIA</b>
OC-15	Selective capillary coatings for in-tube SPME off-line or on-line with LC-MS/MS for bioanalysis <b>Israel Souza</b>
OC-16	Preparative separation of nadolol racemates by fixed-bed liquid chromatography using C18 columns <b>Rami Arafah</b>
OC-17	Hollow fiber microextraction (HF $\mu$ E) - A new hybrid microextraction technique for trace analysis <b>Alessandra Ide</b>
OC-18	Tape Adsorptive Microextraction - A new analytical approach for sample enrichment <b>Nuno Neng</b>
OC-19	Multidimensional chromatographic techniques applied to chemical ecology <b>Eduardo Mateus</b>
OC-20	Síntese de fase estacionária monolítica e posterior imobilização térmica de polidimetilsiloxano (PDMS) sobre a superfície porosa para aplicação em cromatografia líquida capilar <b>Carla Bottoli</b>
<b>Moderator / Moderador - Auditorium B</b> <b>Helena Soares Costa</b> (Instituto Nacional de Saúde Dr. Ricardo Jorge)	
<b>11:00-12:30</b>	<b>Oral session IIIB / Sessão Oral IIIB</b>
OC-21	Permeation of caffeine, CQA and HMF from Coffee silverskin extracts on EpiSkin™ 3D model <b>Diana Pinto</b>
OC-22	NTME/GC-qMS: a powerful strategy for selection sets of cancer-specific VOMs with potential for cancer differentiation <b>Priscilla Figueira</b>
OC-23	Validation of a dSPE-HPLC methodology for the determination of biogenic amines in wines <b>Juliana Ferreira</b>
OC-24	Looking for new contributions in asthma biomarkers - a chromatographic-based approach <b>José Câmara</b>

	OC-25	Gas-chromatography mass spectrometry analysis of <sup>13</sup> C-labeled fatty acids revealed new information about the ruminal biohydrogenation of linolenic acid <b>Susana Alves</b>
	OC-26	Multidetecção de antibióticos em tecidos comestíveis: evolução de estratégias analíticas <b>Andreia Freitas</b>
<b>Moderator / Moderador - Auditorium Dionísio Gonçalves</b> <b>M. Beatriz Oliveira</b> (Universidade do Porto)		
12:30-13:00	EC-03	A new, fast, simple, and ultra-sensitive determination of semi-volatile organic compounds in water samples by GC-MS/MS Triple Quadrupole system <b>Miguel Ángel Pérez</b> Bruker Applications Development Laboratory
13:00-14:30		• Lunch
<b>Moderator / Moderador - Auditorium Dionísio Gonçalves</b> <b>Victor Freitas</b> (Universidade do Porto)		
14:30-15:00	IC-04	Polyphenols identification. Has LC-MS killed HPLC-DAD <b>Celestino Santos-Buelga</b> University of Salamanca, Espanha
<b>15:00-16:30</b>	<b>Oral session IVA / Sessão Oral IVA</b>	
	OC-27	Chromatographic analysis of nutritional and bioactive compounds in vegetative parts of <i>Fragaria vesca</i> L. obtained by in vitro culture <b>Maria Inês Dias</b>
	OC-28	Liquid by-products from canned fish industry as sources of omega-3 polyunsaturated fatty acids <b>Ana Carvalho</b>
	OC-29	Fingerprinting of volatome profile of lemon ( <i>Citrus limonum</i> ) based on a new analytical approach - NTME/GC-MS analysis <b>José Figueira</b>
	OC-30	Perfil fenólico e bioatividades de maçã portuguesa da variedade "Bravo de Esmolfe" <b>Tânia Pires</b>
	OC-31	The volatile profile for discrimination of lavender and heather honey, using solid phase microextraction and gas chromatography-mass spectrometry <b>Soraia Falcão</b>
	OC-32	<i>Geranium robertianum</i> L. phenolic compounds: individual characterization of stems and leaves profile <b>Marcelo Catarino</b>
<b>Moderator / Moderador - Auditorium B</b> <b>Cristina Delerue Matos</b> (Instituto Politécnico do Porto)		
<b>15:00-16:30</b>	<b>Oral session IVB / Sessão Oral IVB</b>	
	OC-33	Ácido 4-hidrazinobenzoico como agente derivatizante para a determinação de aldeídos por HPLC-UV e LC-MS <b>Pedro Brandão</b>
	OC-34	Effects of natural colourants on the fatty acids profile of different ice cream formulations <b>Custódio Roriz</b>
	OC-35	High Throughput Bar Adsorptive Microextraction (HT-BA $\mu$ E): A novel cost-effective tool for monitoring psychotropic drugs in biological matrices <b>Samir Ahmad</b>

	OC-36	Caracterização do perfil fenólico de agrião por HPLC-DAD-ESI/MS e otimização da extração por alta pressão hidrostática utilizando a metodologia de superfície de resposta <b>José Pinela</b>
	OC-37	Polyols based solvents for the extraction of phenolic compounds from <i>Juglans regia</i> L. leaves <b>Vanessa Vieira</b>
	OC-38	Oncolytic virus purification using multi-column chromatography <b>João Mendes</b>
16:30-17:00		• Coffee Break + Poster session
<b>Moderator / Moderador - Auditorium Dionísio Gonçalves</b> <b>Manuela Pintado</b> (Universidade Católica)		
17:00-17:30	EC-04	Aplicações de cromatografia iónica e abordagem às técnicas de preparação em linha de amostras <b>Susana M. M. Pereira</b> MT Brandão Lda
<b>17:30-18:00</b>	<b>Oral session V / Sessão Oral V</b>	
	OC-39	Effects of e-beam irradiation on bioactive content of cherry tomatoes <b>Joana Madureira</b>
	OC-40	Otimização da extração de antocianinas de cereja madura através da metodologia de superfície de resposta <b>Carla Pereira</b>
18:00-19:00	Reunião Grupo de Cromatografia SPQ /Meeting	
20:00	Meeting Dinner / Jantar do Encontro	



Time		December 6	
<b>Moderator / Moderador - Auditorium Dionísio Gonçalves</b> <b>Manuel António Coimbra</b> (Universidade de Aveiro)			
9:00-10:00	PL-03	Comprehensive two-dimensional liquid chromatography in food and natural products analysis <b>Paola Dugo</b> Università di Messina, Itália	
10:00-10:30	IC-05	Separation and concentration of nutraceuticals, active compounds and essential oils from Agro-Food sources using supercritical carbon dioxide <b>Juan Francisco Rodríguez</b> TQUIMA, Espanha	
10:30-11:00		• Coffee Break + Poster session	
<b>Moderator / Moderador - Auditorium Dionísio Gonçalves</b> <b>Alírio Rodrigues</b> (LSRE/LCM, Faculdade de Engenharia, Universidade do Porto)			
11:00-12:00		<b>Oral session VIA / Sessão Oral VIA</b>	
OC-41		Efeito da radiação gama e feixe de eletrões na concentração de ergosterol em <i>Agaricus bisporus</i> (J.E. Lange) Imbach <b>Ângela Fernandes</b>	
OC-42		Optimization of the extraction of triterpenes from <i>Ganoderma lucidum</i> <b>Miguel Angel Prieto</b>	
OC-43		Unveiling the chemical composition of willow added-value lipophilic extractives by gas chromatography-mass spectrometry <b>Patrícia Ramos</b>	
OC-44		Application of anti-hail net in apple orchards: effects on fruits chemical characteristics <b>Carlos Gomes</b>	
<b>Moderator / Moderador - Auditorium B</b> <b>José Câmara</b> (Universidade da Madeira)			
11:00-12:00		<b>Oral session VIB / Sessão Oral VIB</b>	
OC-45		Characterization of the volatile composition of encapsuled coffee <b>Daive Mendes</b>	
OC-46		Increased productivity in impurity profile characterization of innovative pharmaceuticals <b>João Pereira</b>	
OC-47		Characterization of phospholipids, including plasmalogens, in bivalves of the Portuguese coast using solid-phase extraction followed by gas-liquid chromatography <b>Rui Bessa</b>	
OC-48		Characterization and Identification of Four Essential Oils by GC-MS <b>Ana Marques</b>	
<b>Moderator / Moderador - Auditorium Dionísio Gonçalves</b> <b>Luís Pais</b> (Instituto Politécnico de Bragança)			
12:00-12:30	EC-05	Successful generic approaches for heartcutting 2DLC with focus on user friendliness <b>Isabelle François</b> Waters	
12:30-13:00		Closing Session / Sessão de Encerramento	

- PL Plenary communication / Comunicação plenária
- IC Invited oral communication / Comunicação oral convidada
- EC Enterprise oral communication / Comunicação oral de empresa
- OC Oral communication / Comunicação oral



J. Sá Morais

EC - Enterprise oral communications / Comunicações orais de empresas

EC-01	LCMS Technologies: Introducing the Orbitrap for Ultrahigh Resolution Exact Mass and Unequivocal ID <i>Daniel Ettlin</i>	12
EC-02	Nexera UC Online SFE-SFC-MS System <i>Jose Manuel Macias, Manuel Lucini, Franz Kramp</i>	13
EC-03	A new, fast, simple, and ultra-sensitive determination of semi-volatile organic compounds in water samples by GC-MS/MS Triple Quadrupole system <i>Diego Martín-Ortiz, Javier López, Miguel Ángel Pérez</i>	14
EC-04	Aplicações de cromatografia iónica e abordagem às técnicas de preparação em linha de amostras <i>Susana M. M. Pereira</i>	15
EC-05	Successful generic approaches for heartcutting 2DLC with focus on user friendliness <i>Isabelle François</i>	16

OC - Oral communications / Comunicações orais

OC-01	A multiresidue targeting approach for pesticide detection in olive oil: the role of dual-layer solid-phase extraction based on molecular imprinting technology <i>Raquel Garcia, Elisabete P. Carreiro, Marco Gomes da Silva, Anthony J. Burke, Ana Maria Costa Freitas, Maria João Cabrita</i>	18
OC-02	New brush-type chiral stationary phases based on xanthone derivatives for liquid chromatography <i>Carla Fernandes, Maria Elizabeth Tiritan, Madalena M.M. Pinto</i>	19
OC-03	Chromatographic techniques to assess the profile of biomolecules in different mycorrhizal mushroom species <i>Filipa S. Reis, Anabela Martins, Lillian Barros, M. Helena Vasconcelos, Patricia Morale, Isabel C.F.R. Ferreira</i>	20
OC-04	Multicolumn based liquid chromatography processes for the separation of nadolol racemates <i>António E. Ribeiro, Rami S. Arafah, Alírio E. Rodrigues, Luís S. Pais</i>	21
OC-05	An expanded bed chromatography approach for improving human mesenchymal stem cells purification <i>Ricardo J.S. Silva, Bárbara Cunha, Margarida Serra, Manuel J.T. Carrondo, Cristina Peixoto, Paula M. Alves</i>	22
OC-06	Chromatographic analysis of biological samples using monolithic columns <i>Marcela A. Segundo, Inês I. Ramos, Luísa Barreiros, Sofia A.C. Lima, Salette Reis</i>	23

OC-07		
	<a href="#">Avaliação da qualidade do ar em espaços de um edifício de ciências</a>	24
	<i>Sara Santos, J.M.F.Nogueira, Cristina Oliveira</i>	
OC-08		
	<a href="#">Engineered polymer particles for the valorization of phenolic compounds present in mixtures obtained through supercritical extraction</a>	25
	<i>Catarina P. Gomes, Gayane Sadoyan, Rolando C.S. Dias, Mário Rui P.F.N. Costa</i>	
OC-09		
	<a href="#">Thermostability studies of oil-soluble cyanidin-3-glucoside dyes</a>	26
	<i>Marta Guimarães, Nuno Mateus, Victor Freitas, Luís Cruz</i>	
OC-10		
	<a href="#">Adsorption equilibrium and kinetics of CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> and N<sub>2</sub> on zeolite BETA with different cations and SiO<sub>2</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ratio</a>	27
	<i>Adriano Henrique, José A.C. Silva, Alírio E. Rodrigues</i>	
OC-11		
	<a href="#">Seawater degradation studies of gallic acid persulfate, a promising synthetic antifouling agent</a>	28
	<i>Cátia Vilas-Boas, Sara Cravo, Emília Sousa, Madalena Pinto, Marta Correia-da-Silva</i>	
OC-12		
	<a href="#">BeerOmics: how can advanced gas chromatography help to understand beer aroma properties?</a>	29
	<i>Cátia Martins, Tiago Brandão, Adelaide Almeida, Sílvia M. Rocha</i>	
OC-13		
	<a href="#">Phenolic composition, antioxidant and biological activities of Portuguese vine shoot from <i>Touriga Nacional</i> and <i>Tinta Roriz</i> varieties</a>	30
	<i>Manuela M. Moreira, M. Fátima Barroso, João Vasconcellos Porto, M.J. Ramalhosa, Jaroslava Švarc-Gajić, Letícia Estevinho, Simone Morais, Cristina Delerue-Matos</i>	
OC-14		
	<a href="#">Caracterização química e bioatividades de <i>Hibiscus sabdariffa</i> L.</a>	31
	<i>Inês Jabeur, Eliana Pereira, Lillian Barros, Ricardo C. Calhelha, Marina Soković, Isabel C.F.R. Ferreira</i>	
OC-15		
	<a href="#">Selective capillary coatings for in-tube SPME off-line or on-line with LC-MS/MS for bioanalysis</a>	32
	<i>Israel Donizeti de Souza, Maria Eugênia Costa Queiroz</i>	
OC-16		
	<a href="#">Preparative separation of nadolol racemates by fixed-bed liquid chromatography using C18 columns</a>	33
	<i>Rami S. Arafah, António E. Ribeiro, Alírio E. Rodrigues, Luís S. Pais</i>	
OC-17		
	<a href="#">Hollow fiber microextraction (HF<math>\mu</math>E) - A new hybrid microextraction technique for trace analysis</a>	34
	<i>Alessandra H. Ide, J.M.F. Nogueira</i>	
OC-18		
	<a href="#">Tape Adsorptive Microextraction - A new analytical approach for sample enrichment</a>	35
	<i>Nuno R. Neng, Samir M. Ahmad, José M.F. Nogueira</i>	
OC-19		
	<a href="#">Multidimensional chromatographic techniques applied to chemical ecology</a>	36
	<i>Eduardo Mateus, Sofia Branco, Davide Mendes, Marco Gomes da Silva, Maria Rosa Paiva</i>	
OC-20		
	<a href="#">Síntese de fase estacionária monolítica e posterior imobilização térmica de polidimetilsiloxano (PDMS) sobre a superfície porosa para aplicação em cromatografia líquida capilar</a>	37
	<i>Fabiane Pires, Carla Beatriz Grespan Bottoli</i>	
OC-21		
	<a href="#">Permeation of caffeine, CQA and HMF from Coffee silverskin extracts on EpiSkin™ 3D model</a>	38
	<i>Francisca Rodrigues, Diana Pinto, Filipa B. Pimentel, Rita C. Alves, M. Beatriz P.P. Oliveira</i>	
OC-22		
	<a href="#">NTME/GC-qMS: a powerful strategy for selection sets of cancer-specific VOMs with potential for cancer differentiation</a>	39
	<i>Priscilla Porto-Figueira, Jorge Pereira, José S. Câmara</i>	

OC-23		
	<a href="#">Validation of a dSPE-HPLC methodology for the determination of biogenic amines in wines</a>	40
	<i>Juliana Milheiro, Leonor C. Ferreira, Luís Filipe-Ribeiro, Fernanda Cosme, Fernando M. Nunes</i>	
OC-24		
	<a href="#">Looking for new contributions in asthma biomarkers - a chromatographic-based approach</a>	41
	<i>Pedro H. Berenguer, Catarina L. Silva, Irene C. Camacho, José S. Câmara</i>	
OC-25		
	<a href="#">Gas-chromatography mass spectrometry analysis of <sup>13</sup>C-labeled fatty acids revealed new information about the ruminal biohydrogenation of linolenic acid</a>	42
	<i>Susana P. Alves, Rui J.B. Bessa</i>	
OC-26		
	<a href="#">Multidetecção de antibióticos em tecidos comestíveis: evolução de estratégias analíticas</a>	43
	<i>Andreia Freitas, Ana Sofia Vila Pouca, Sílvia Barros, Jorge Barbosa</i>	
OC-27		
	<a href="#">Chromatographic analysis of nutritional and bioactive compounds in vegetative parts of <i>Fragaria vesca</i> L. obtained by in vitro culture</a>	44
	<i>Maria Inês Dias, Lillian Barros, Maria João Sousa, Celestino Santos-Buelga, Isabel C.F.R. Ferreira</i>	
OC-28		
	<a href="#">Líquidos por produtos da indústria de peixe enlatado como fontes de ácidos gordos poliinsaturados omega-3</a>	45
	<i>Ana P. Carvalho, Ana Monteiro, Diogo Paquincha, Florinda Martins, Rui P. Queirós, Jorge A. Saraiva, Aleksandra Cvetanovic, Jaroslava Svarc-Gajic, Cristina Delerue-Matos</i>	
OC-29		
	<a href="#">Fingerprinting of volatome profile of lemon (<i>Citrus limonum</i>) based on a new analytical approach - NTME/GC-MS analysis</a>	46
	<i>José A. Figueira, Priscilla Porto-Figueira, Jorge Pereira, José S. Câmara</i>	
OC-30		
	<a href="#">Perfil fenólico e bioatividades de maçã portuguesa da variedade “Bravo de Esmolfe”</a>	47
	<i>Tânia C.S.P. Pires, Maria Inês Dias, Lillian Barros, Maria José Alve, Celestino Santos-Buelga, Isabel C.F.R. Ferreira</i>	
OC-31		
	<a href="#">O perfil volátil para discriminação de lavanda e mel de heather, usando extração em fase sólida e cromatografia de gases acoplada a espectrometria de massas</a>	48
	<i>Soraia I. Falcão, Elsa Caveiro, Paulo Russo-Almeida, M. Carmen Seijo, Vitor Martins, Miguel Vilas-Boas</i>	
OC-32		
	<a href="#"><i>Geranium robertianum</i> L. fenólicos: caracterização individual de caules e folhas</a>	49
	<i>Marcelo D. Catarino, Artur M.S. Silva, Susana M. Cardoso</i>	
OC-33		
	<a href="#">Ácido 4-hidrazinobenzoico como agente derivatizante para a determinação de aldeídos por HPLC-UV e LC-MS</a>	50
	<i>Pedro F. Brandão, Rui M. Ramos, Luís M. Gonçalves, Arnaldo A. Cardoso, Elisabete A. Pereira, José A. Rodrigues</i>	
OC-34		
	<a href="#">Efeitos de corantes naturais no perfil de ácidos gordos de diferentes formulações de sorvete</a>	51
	<i>Custódio Lobo Roriz, João C.M. Barreira, Patrícia Morales, Lillian Barros, Isabel C.F.R. Ferreira</i>	
OC-35		
	<a href="#">High Throughput Bar Adsorptive Microextraction (HT-BA<math>\mu</math>E): A novel cost-effective tool for monitoring psychotropic drugs in biological matrices</a>	52
	<i>Samir M. Ahmad, J.M.F. Nogueira</i>	
OC-36		
	<a href="#">Caracterização do perfil fenólico de agrião por HPLC-DAD-ESI/MS e otimização da extração por alta pressão hidrostática utilizando a metodologia de superfície de resposta</a>	53
	<i>José Pinela, M.A. Prieto, Lillian Barros, Ana Maria Carvalho, M. Beatriz P.P. Oliveira, Jorge A. Saraiva, Isabel C.F.R. Ferreira</i>	
OC-37		
	<a href="#">Solventes baseados em polímeros para a extração de fenólicos de <i>Juglans regia</i> L. folhas</a>	54
	<i>Vanessa Vieira, Miguel A. Prieto, Lillian Barros, João A.P. Coutinho, Isabel C.F.R. Ferreira, Olga Ferreira</i>	

OC-38		
<a href="#">Oncolytic virus purification using multi-column chromatography</a>		55
<i>João Mendes, Ricardo J.S. Silva, Cristina Peixoto, Paula M. Alves, Manuel J.T. Carrondo</i>		
OC-39		
<a href="#">Effects of e-beam irradiation on bioactive content of cherry tomatoes</a>		56
<i>Joana Madureira, Maria Cojocar, Silvia Garofalide, Pedro M.P. Santos, Fernanda M.A. Margaça, Sandra Cabo Verde</i>		
OC-40		
<a href="#">Otimização da extração de antocianinas de cereja madura através da metodologia de superfície de resposta</a>		57
<i>Carla Pereira, Lillian Barros, Miguel A. Prieto, Isabel C.F.R. Ferreira</i>		
OC-41		
<a href="#">Efeito da radiação gama e feixe de eletrões na concentração de ergosterol em <i>Agaricus bisporus</i> (J.E. Lange) Imbach</a>		58
<i>Ângela Fernandes, Rossana V.C. Cardoso, Amílcar L. Antonio, Sandra Cabo Verde, Lillian Barrosa, Isabel C.F.R. Ferreira</i>		
OC-42		
<a href="#">Optimization of the extraction of triterpenes from <i>Ganoderma lucidum</i></a>		59
<i>Oludemi Taofiq, Lillian Barros, Miguel A. Prieto, Maria Filomena Barreiro, Isabel C.F.R. Ferreira</i>		
OC-43		
<a href="#">Unveiling the chemical composition of willow added-value lipophilic extractives by gas chromatography-mass spectrometry</a>		60
<i>Patrícia A.B. Ramos, Sónia A.O. Santos, Carmen S.R. Freire, Artur M.S. Silva, Armando J.D. Silvestre</i>		
OC-44		
<a href="#">Application of anti-hail net in apple orchards: effects on fruits chemical characteristics</a>		61
<i>Carlos Martins-Gomes, Luís Pinto, Ermelinda Silva, Sandra Martins, Alexandre Gonçalves, Cátia Brito, José Moutinho-Pereira, M.A. Rodrigues, Carlos M. Correia, Fernando Nunes</i>		
OC-45		
<a href="#">Characterization of the volatile composition of encapsuled coffee</a>		62
<i>Davide Mendes, Pedro Lisboa, Pedro Simões, Eduardo Mateus, Marco Gomes da Silva</i>		
OC-46		
<a href="#">Increased productivity in impurity profile characterization of innovative pharmaceuticals</a>		63
<i>João Pereira, Antonio Serodio, Cátia Sousa</i>		
OC-47		
<a href="#">Characterization of phospholipids, including plasmalogens, in bivalves of the Portuguese coast using solid-phase extraction followed by gas-liquid chromatography</a>		64
<i>Vera Faneca, Susana P. Alves, Rui J.B. Bessa</i>		
OC-48		
<a href="#">Characterization and Identification of Four Essential Oils by GC-MS</a>		65
<i>Mariana Oliveira, Carlos Borges, Ana Patrícia Marques</i>		

## PC - Panel communications / Comunicações em painel

PC1		
<a href="#">Optimization of an HPLC analysis to study the interactions between a <i>Saccharomyces cerevisiae</i> protein-rich extract and wine procyanidins</a>		68
<i>Abigail F. Ferreira, Telmo Francisco, Rosa Pérez-Gregorio, Susana Soares, Nuno Mateus, Victor de Freitas</i>		
PC2		
<a href="#">Phenolic compounds from <i>Annona muricata</i> L.: HPLC-DAD analysis of the aqueous extract and nanoformulations</a>		69
<i>Clara Grosso, Simona Mancini, Luca Nardo, Maria Gregori, João Bernardo, Inês Ribeiro, Francesco Mantegazza, Massimo Masserini, Cristina Delerue-Matos</i>		

## OC-36

# Caracterização do perfil fenólico de agrião por HPLC-DAD-ESI/MS e otimização da extração por alta pressão hidrostática utilizando a metodologia de superfície de resposta

José Pinela<sup>a,b</sup>, M.A. Prieto<sup>a,c</sup>, Lillian Barros<sup>a</sup>, Ana Maria Carvalho<sup>a</sup>, M. Beatriz P.P. Oliveira<sup>b</sup>, Jorge A. Saraiva<sup>d</sup>, Isabel C.F.R. Ferreira<sup>a,\*</sup>

<sup>a</sup>Centro de Investigação de Montanha (CIMO), Instituto Politécnico de Bragança, Portugal

<sup>b</sup>REQUIMTE/LAQV, Faculdade de Farmácia, Universidade do Porto, Portugal

<sup>c</sup>Nutrition and Bromatology Group, Faculty of Food Science and Technology, University of Vigo, Spain

<sup>d</sup>QOPNA, Departamento de Química, Universidade de Aveiro, Portugal

\*iferreira@ipb.pt

A tecnologia de alta pressão (AP) é cada vez mais utilizada na indústria alimentar como método de pasteurização a frio. A sua utilização para extração de compostos de elevado valor acrescentado a partir de matrizes vegetais é relativamente recente e tem sido indicada como uma boa alternativa aos métodos convencionais, pois evita a degradação de moléculas termossensíveis e pode melhorar a eficiência da extração em termos de rendimento, qualidade e seletividade [1-4]. Neste sentido, este trabalho teve como objetivos caracterizar o perfil fenólico de agrião (*Nasturtium officinale* R. Br.), uma planta semiaquática de crescimento rápido com propriedades medicinais [5], e otimizar a extração destes compostos por AP utilizando a metodologia de superfície de resposta. As amostras de agrião liofilizadas foram processadas por AP de acordo com um desenho fatorial completo de cinco níveis, combinando as variáveis tempo de processamento ( $t$ , 1.5-33.5 min), pressão ( $P$ , 0.1-600 MPa) e solvente ( $S$ , 0-100 % de etanol, v/v). Os compostos fenólicos foram analisados por HPLC-DAD-ESI/MS e os resultados da quantificação foram usados como variáveis de resposta. Os flavonoides predominaram sobre os ácidos fenólicos e, em geral, foram quantificados mais derivados glicosídeos de quercetina e de isoramnetina do que ácidos fenólicos. Quatro derivados glicosídeos de kaempferol foram identificados pela primeira vez nesta espécie. Os modelos teóricos obtidos foram ajustados com sucesso aos dados experimentais, validados estatisticamente e utilizados nas etapas de otimização e predição. As condições ótimas de AP para extração foram as seguintes:  $t= 3,1$  min,  $P= 600$  MPa e  $S= 100\%$  e originaram  $64,68\pm 2,97$  mg/g de extrato [4]. Este estudo destacou a AP como uma tecnologia promissora para extrair compostos fenólicos (ácidos fenólicos e flavonoides) de agrião de forma seletiva usando um solvente verde e tempos de extração reduzidos.

### Acknowledgements:

À Fundação para a Ciência e Tecnologia (FCT) e FEDER, no âmbito do Programa PT2020, pelo apoio financeiro ao CIMO (UID/AGR/00690/2013), ao REQUIMTE/LAQV (UID/QUI/50006/2013- POCI/01/0145/FERDER/007265) e à unidade de investigação QOPNA (FCT/ID/QUI/00062/2013), pela bolsa (SFRH/BD/92994/2013) atribuída a J. Pinela e pelo contrato de L. Barros; à Xunta de Galicia pelo apoio financeiro a M.A. Prieto; e ao Interreg Espanha-Portugal pelo apoio financeiro através do projeto 0377\_Iberphenol\_6\_E.

### References:

- [1] V. Briones-Labarca, M. Plaza-Morales, C. Giovagnoli-Vicuña, F. Jamett. *LWT - Food Sci. Technol.* 2015, 60, 525–534.
- [2] H.-W. Huang, C.-P. Hsu, B.B. Yang, C.-Y. Wang. *Trends Food Sci. Technol.* 2013, 33, 54–62.
- [3] E.M.C. Alexandre, P. Araújo, M.F. Duarte, et al. *J. Food Sci. Technol.* 2017, 54, 2519–2531.
- [4] J. Pinela, M.A. Prieto, L. Barros, et al. *Sep. Purif. Technol.* 2017, In press.
- [5] C.I.R. Gill, S. Haldar, L.A. Boyd, et al. *Am. J. Clin. Nutr.* 2007, 85, 504–510.