

# XXIII Encontro Nacional da SPQ



*Aveiro 12 a 14 de Junho de 2013*



**Título**

*Livro de Resumos do XXIII Encontro Nacional da SPQ  
Desafios em Química*

**Coordenadores**

*Diana C. G. A. Pinto e Artur M. S. Silva*

**Fotografias**

*José M. G. Pereira*

**Fotografia da Capa**

*Departamento de Química e Laboratórios Tecnológicos da Universidade de Aveiro*

**Edição**

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

**Data**

*Junho de 2013*

**Tiragem**

**350** Exemplares

**Depósito Legal**

360265/13

**Impressão e acabamentos**

*Sersilito-Empresa Gráfica, Lda.*

**Catálogo recomendada**

---

Livro de resumos do XXIII Encontro Nacional da SPQ - Desafios em Química  
Universidade de Aveiro, 2013 – 387 p.

Química - Congressos

---

Reservados todos os direitos. Esta publicação não pode ser reproduzida ou transmitida, no todo ou em parte, por qualquer processo, eletrónico, mecânico, fotocópia, gravação ou outros, sem prévia autorização do Editor.

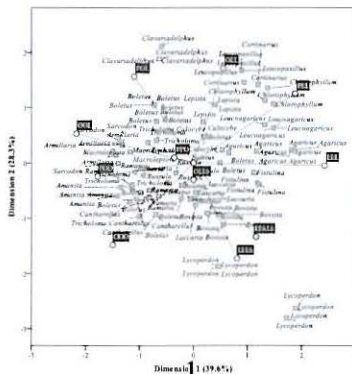
---

## Triacylglycerols profile and principal component analysis as a chemometric tool to identify wild edible mushroom genera

João C. M. Barreira,<sup>a,b</sup> M. Beatriz P. P. Oliveira<sup>b</sup>, Isabel C. F. R. Ferreira<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Mountain Research Center (CIMO), ESA, Polytechnic Institute of Bragança, Apartado 1172, 5301-855 Bragança, Portugal; <sup>b</sup>REQUIMTE, Department of Chemical Sciences, Faculty of Pharmacy, University of Porto, Rua Jorge Viterbo Ferreira, 228, 4050-313 Porto, Portugal

The Northeast of Portugal is among the European regions with high diversity of wild mushrooms, some with recognized gastronomic value. Due to the high resemblance among mushroom species belonging to the same genus, finding a distinctive chemometric marker to identify mushroom species is a mandatory task. The lipidic fraction of a natural product has a characteristic pattern of triacylglycerol (TAG), comprising specific information due to the genetic control of the stereospecific distribution of fatty acids (FA) on the glycerol molecule, which is typical for each species.<sup>[1]</sup> Principal component analysis (PCA) was previously applied to classify mushroom samples according to their fatty acids profile.<sup>[2]</sup> However, despite TAG profile was used before to assess the authenticity of oils,<sup>[3]</sup> it was not used as taxonomical marker. Accordingly, TAG profile was evaluated in 30 wild mushroom species and the results were classified by PCA to identify their discriminant ability. TAG profiles obtained by high performance liquid chromatography coupled to an evaporative light scattering detector showed significant differences among species. The PCA biplot (1) showed that TAG profiles recorded for different mushroom genera may be used as an effective differentiating tool, especially when lowering the taxonomical rank, indicating that TAG profile is most related with the lowest ranks. In conclusion, this chemometric approach might be used as a practical tool to identify mushroom species.



**Acknowledgments:** Authors are grateful to Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT, Portugal) and COMPETE/QREN/EU for financial support to this work (research project PTDC/AGR-ALI/110062/2009), to CIMO (strategic project PEst-OE/AGR/UI0690/2011) and to REQUIMTE (PEst-C/EQB/LA0006/2011). J.C.M. Barreira thanks FCT, POPH-QREN and Fundo Social Europeu for his grant (SFRH/BPD/72802/2010).

### References

- [1] Buchgraber, M.; Ulberth, F.; Emons, H.; Anklam, E. *Eur. J. Lipid Sci. Tech.* **2004**, *106*, 621.
- [2] Marekov, I.; Momchilova, S.; Grung, B.; Nikolova-Damyanova, B. *J. Chromatogr. (B)* **2012**, *910*, 54.
- [3] Rombaut, R.; De Clercq, N.; Foubert, I.; Dewettinck, K. *J. Am. Oil Chem. Soc.* **2009**, *86*, 19.

# Programa Científico do XXIII EN-SPQ

12 de junho – Quarta-feira			
09:00-11:00 h	Entrega de documentação e afixação de comunicações em painel		
<i>Sala</i> 11:00-11:25 h	23.1.5		
	Sessão de abertura e boas-vindas Lições Prémio Ferreira da Silva		
<i>Sala</i> <i>Chairperson</i>	23.1.5 <i>Mário Nuno Berberan e Maria José Cathorda</i>		
11:25-12:10 h	<i>José Luís Costa Lima</i> , Faculdade de Farmácia, Universidade do Porto <i>Deteção electroquímica em sistemas automáticos de fluxo contínuo</i>		
12:10-12:55h	<i>Armando Pombeiro</i> , Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa <i>Metal-assisted and Metal-catalyzed Activation of Small Molecules</i>		
13:00-14:30 h	Almoço		
<i>Sala</i> <i>Chairperson</i> 14:30-15:15 h	23.1.5 <i>Ana Cavaleiro</i> PL1 - <i>Achim Müller</i> , Faculty of Chemistry, University of Bielefeld, Germany <i>Inorganic Cells Nanocapsules: Reactions Inside and with their Environment</i>		
<i>Sala</i>  <i>Chairperson</i>	23.1.5 Tema: Novos produtos e materiais sustentáveis <i>Graça Neves</i>	23.1.6 Tema: Interfaces da Química: saúde, segurança, alimentação, ambiente e energia <i>Armando Duarte</i>	23.1.7 Tema: Novas tecnologias <i>Balasar de Castro</i>
15:15-15:45 h	CC1.1 - <i>Mariette Pereira</i> , Departamento de Química, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade de Coimbra <i>Immobilized Multicatalytic Systems for Tandem Reactions</i>	CC2.1 - <i>Miguel Castanho</i> , Instituto de Bioquímica, Faculdade de Medicina, Universidade de Lisboa <i>The physical chemistry of Dengue virus entry into cells revisited</i>	CC3.1 - <i>Uwe Pischel</i> , University of Huelva, Spain <i>Fluorescent and Photoswitchable Supramolecular Assemblies with Cucurbituril Nanocapsules</i>
15:45-16:15 h	CC1.2 - <i>Jorge Parola</i> , Departamento de Química, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa <i>Photochromic and Photoswitching Systems based on 2-Hydroxychalcones</i>	CC2.2 - <i>Joaquim Esteves da Silva</i> , Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências da Universidade do Porto <i>O estado excitado da luciferina e o mecanismo bioluminescente da luciferase</i>	CC3.2 - <i>Gema de la Torre</i> , Departamento de Química Orgánica, Universidad Autónoma de Madrid, Spain <i>Ensembles of Porphyrinoids and Carbon Nanoforns: Hybrid Systems for Solar Energy Conversion</i>
16:15-17:45 h	Primeira sessão de comunicações em painel - discussão e intervalo para café		
17:45-18:15 h	CC1.3 - <i>Maria Dens Carvalho</i> , Dept. Química e Bioquímica - Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa <i>Nanopartículas magnéticas para utilização em hipertermia</i>	CC2.3 - <i>Isabel C.F.R. Ferreira</i> , Escola Superior Agrária, Instituto Politécnico de Bragança <i>Biomolecules in wild edible mushrooms: The interface between nutritional and bioactive properties</i>	CC3.3 - <i>Tito Trindade</i> , Departamento de Química, Universidade de Aveiro <i>Eco-nanomagnets: new materials for water purification technologies</i>
18:15-18:30 h	CO1.1 - <i>Mariana Rocha</i> , REQUIMTE, Chemistry and Biochemistry Department, Faculty of Sciences, Porto University <i>In situ decoration of N-doped CNTs with magnetic nanoparticles and their application in textile dyes removal</i>	CO2.1 - <i>M. Rosário M. Domingues</i> , Mass Spectrometry Centre, UI-QOPNA - Department of Chemistry, University of Aveiro <i>Structural modifications of glycosyl oligo and polysaccharides during dry roasting</i>	CO3.1 - <i>Marta Nunes</i> , REQUIMTE - Department of Chemistry and Biochemistry, Faculty of Sciences, University of Porto <i>Hybrid electrochromic materials based on poly[Ni(salen)]-type films and TiO<sub>2</sub> nanoparticles</i>
18:30-18:45 h	CO1.2 - <i>João Sotomayor</i> , REQUIMTE, Departamento de Química, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa <i>Digital memories based on PDECS</i>	CO2.2 - <i>Sônia M. Rodrigues</i> , Department of Chemistry & CESAM, University of Aveiro <i>Bioavailability of metal-based engineered nanoparticles in terrestrial foodchains</i>	CO3.2 - <i>Gonçalo F. F. Sá</i> , LaserLeap Technologies, IPN <i>Dermal drug delivery with photoacoustic waves generated by piezophotonic materials</i>
18:45-... 20:00-...	Assembleia geral da SPQ Recepção – Cantina Universitária do Crasto		

13 de junho – Quinta-feira

<p><b>Chairperson</b> <i>Sala</i> 09:00-09:45h</p>	<p><b>Arrur Silva</b> 23.1.3 P1.2 - <i>Toxic Screening</i>: Department of Chemistry, University of Aarhus, Denmark <i>Efficacy Translational MetC analysis with Low Molecular Weight Drugs</i></p>		
<p><b>Chairperson</b> 09:45-10:15h</p>	<p><b>Joaquim Faria</b> C01.4 - <i>Cristina Freire</i>, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências da Universidade do Porto <i>Nanotechnology for Textile applications: novel hybrid nanomaterials for the production of high-performance functional fabrics</i></p>	<p>23.1.6 Tema: Interfaces da Química: saúde, segurança, alimentação, ambiente e energia C02.4 - <i>Manuel António Coimbra</i>, Departamento de Química, Universidade de Aveiro <i>Polysaccharides chemistry: food applications</i></p>	<p>23.1.7 Tema: Novas tecnologias Mamada R. Curral C03.4 - <i>Pedro T. Gomes</i>, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico <i>A new family of nobiletin-immunosilica tetra-coordinate boron complexes: synthesis, characterization and application in OLEDs</i></p>
<p>10:15-10:45h</p>	<p>C01.5 - <i>Augusto Tomé</i>, Departamento de Química, Universidade de Aveiro <i>Polymers and other tetrapyrrole macrocycles: functionalization and applications</i></p>	<p>C02.5 - <i>Paula Margarida Ferreira</i>, Departamento de Química, Universidade do Minho <i>New hydrogels based on small dehydropeptides for biomedical applications</i></p>	<p>C03.5 - <i>Adelino Mendes</i>, Faculdade de Engenharia, Universidade do Porto <i>The Sustainable Valor Cells - New opportunity for building integrated Pt</i></p>
<p>10:45-11:10h</p>	<p>C01.6 - <i>Nuno Mateus</i>, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade do Porto <i>Ambercetin metabolites: chemical standards for biological studies</i></p>	<p>C02.6 - <i>Eluárdua Fernandes</i>, Faculdade de Farmácia, Universidade do Porto <i>Immunogenic probes: Study of the modulatory effect of flavonoids on oxidative burst in human neutrophils</i></p>	<p>C03.6 - <i>Jorge Morgado</i>, Departamento de Bioengenharia, Instituto Superior Técnico <i>Cebolin solares orgânicos: a Química na procura de soluções energéticas sustentáveis</i></p>
<p>11:40-11:55h</p>	<p>C01.3 - <i>Liliana C. Tomé</i>, Instituto de Tecnologia Química e Biológica, Universidade Nova de Lisboa and CICECO, Departamento de Química, Universidade de Aveiro <i>Membranes based on poly(ionic liquids) new sustainable perspectives for CO<sub>2</sub> separation</i></p>	<p>C02.3 - <i>Filomena Martins</i>, Departamento de Química e Bioquímica, Centro de Química e Bioquímica (CQB), Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa <i>In the quest of new antimicrobial drugs: when public health challenges chemistry</i></p>	<p>C03.3 - <i>Marta Carochio</i>, Monaghan Research Center (FIMD), ESA, Polytechnic Institute of Bragança, Portugal <i>Gamma and electron beam irradiation as an alternative for post-irradiation treatment: a case study with chitosans</i></p>
<p>11:55-12:10h</p>	<p>C01.4 - <i>Ana Paula Patra</i>, Centro de Química e Bioquímica, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (DOB-FCL) <i>Exercício líquido-líquido de plantadilí e produçãoli de substâncias cloradas aromáticas. Potencial aplicação a reciclagem de catálisadores autorrenováveis em fim de vida</i></p>	<p>C02.4 - <i>Joel J. G. Moura</i>, REQUINTE, Departamento de Química, CQB, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa <i>Characterization of a novel Mo-Cu clusters in proteins synthesis of structural probe-chelators</i></p>	<p>C03.4 - <i>Carmen S. R. Freire</i>, CICECO and Department of Chemistry, University of Aveiro <i>Functional bisoxazol nanocomposites: preparation strategies and applications</i></p>
<p><b>Sala</b> <b>Chairperson</b> 12:10-12:55h</p>	<p><b>Jose Cavaleiro</b> 23.1.5 P1.3 - <i>Vitor Ferreira</i>, Presidente da Sociedade Brasileira de Química e Instituto de Química e Instituto de Estudos Gerais, Universidade Federal Fluminense, Brasil <i>On designs of Quinizar e do profissional da Química para o Século XXI</i></p>	<p>23.1.6 Tema: Interfaces da Química: saúde, segurança, alimentação, ambiente e energia M. Inês Cristina C02.7 - <i>Hermínia de Sousa</i>, Departamento de Eng. Química, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade de Coimbra (Nome) <i>Grown and Monoclonal antibodies on the Development of Pharmaceutical and Biomedical</i></p>	<p>23.1.7 Tema: Energética e realidade Vitor Freitas C04.1 - <i>Pedro Alexandrino Fernandes</i>, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências da Universidade do Porto <i>Secrets Reveal! Enzyme Researcher Brings it in Light by In</i></p>
<p>12:55-14:30h</p>	<p><b>Sala</b> 23.1.5 Tema: Novos produtos e materiais sustentáveis</p>	<p>23.1.6 Tema: Interfaces da Química: saúde, segurança, alimentação, ambiente e energia M. Inês Cristina</p>	<p>23.1.7 Tema: Energética e realidade Vitor Freitas</p>
<p><b>Chairperson</b> 14:30-15:00h</p>	<p><b>Jose Cavaleiro</b> C01.7 - <i>Anike Kijou</i>, Instituto de Ciências Biomédicas Abel Salazar, Universidade do Porto <i>Bioactive Secondary Metabolites from Neosartorya pseudobisleri</i></p>	<p>23.1.6 Tema: Interfaces da Química: saúde, segurança, alimentação, ambiente e energia M. Inês Cristina</p>	<p>23.1.7 Tema: Energética e realidade Vitor Freitas</p>

Intervalo para almoço

		<i>Applications</i>	<i>Silico Simulations</i>
15:00-15:15h	<b>CO1.5 - Ana M. L. Seca</b> , Department of Chemistry & QOPNA, University of Aveiro and DCTD, University of Azores <i>Valuable compounds on conifers, macroalgae and halophyte species</i>	<b>CO2.5 - Maria Freitas</b> , REQUIMTE, Departamento de Ciências Químicas, Laboratório de Química Aplicada, Faculdade de Farmácia, Universidade do Porto <i>Effect of acetaminophen in human neutrophils' oxidative burst and lifespan in vitro</i>	<b>CO4.1 - Nuno A. G. Bandeira</b> , Institute of Chemical Research of Catalonia, ICIO, and Department de Química Física i Inorgànica, Universitat Rovira i Virgili <i>Understanding the CO<sub>2</sub> sequestering ability of the spherical polyoxomolybdate [Mo<sub>13</sub>] – a computational perspective</i>
15:15-15:30h	<b>CO1.6 - Jorge Saraiva</b> , Departamento de Química, Universidade de Aveiro <i>High pressure - a new paradigm for food preservation processing and biotechnological applications?</i>	<b>CO2.6 - Flávio Figueira</b> , Department of Chemistry & QOPNA, University of Aveiro <i>Polyamino-[28]hexaphyrins as anion binding agents</i>	<b>CO4.2 - Jorge M. C. Marques</b> , Departamento de Química, Universidade de Coimbra <i>Microsolution of alkali-metal ions: what do we learn from cluster structure optimization?</i>
15:30-15:45h	<b>CO1.7 - Ana M.R.B. Xavier</b> , Department of Chemistry & CICECO, University of Aveiro <i>Cellulosic based biorefinery for pulp and paper industry valorization</i>	<b>CO2.7 - João C. M. Barreira</b> , Polytechnic Institute of Bragança, and Department of Chemical Sciences, Faculty of Pharmacy, University of Porto <i>Triacylglycerols profile and principal component analysis as a chemometric tool to identify wild edible mushroom genera</i>	<b>CO4.3 - Eliana S. Da Silva</b> , Department of Chemistry, University of Coimbra and Clermont Université, Université Blaise Pascal <i>Effect of substituents groups of naphthalene derivatives excited states properties</i>
15:45-19:30 h	<b>Visita ao Aliança Underground Museum</b>		
20:00-...	<b>Jantar do Congresso - Cantina Universitária do Crasto</b>		

<b>14 de junho – Sexta-feira</b>			
<b>Sala</b> <b>Chairperson</b> 09:00-09:45 h	<b>23.1.5</b> <b>João Rocha</b> <b>PL4 - Jacques Livage</b> , College de France, Paris, France <i>Bio-inspired nanomaterials</i>		
<b>Sala</b>  <b>Chairperson</b>	<b>23.1.5</b> <b>Tema: Divulgação e educação em química</b>	<b>23.1.6</b> <b>Tema: Interfaces da Química: saúde, segurança, alimentação, ambiente e energia</b> <b>Artur Silva</b>	<b>23.1.7</b> <b>Tema: Energética e reatividade</b> <b>João Coutinho</b>
09:45-10:15 h	<b>CC5.1 - Teixeira Dias</b> , Departamento de Química, Universidade de Aveiro <i>Ensino de Química a alunos dos cursos de Ciências e Engenharias - Reflexões sobre experiência pessoal</i>	<b>CC2.8 - Carlos Lodeiro</b> , Departamento de Química, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa <i>New Lights for Mercury Detection: From Single chemosensors to solid supported and nanoparticle systems</i>	<b>CC4.2 - Luís Belchior Santos</b> , Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências da Universidade do Porto <i>Molecular and Supramolecular Understanding of Thermophysical Properties</i>
10:15-11:30 h	<b>Segunda sessão de comunicações em painel - discussão e intervalo para café</b>		
11:30-12:00 h	<b>CC5.2 - Raquel Gonçalves Maia</b> , Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa <i>A torre das ciências</i>	<b>CC2.9 - Paula Andrade</b> , Faculdade de Farmácia da Universidade do Porto <i>Flavonoids: synergisms and antagonisms with glutathione</i>	<b>CC4.3 - José R. B. Gomes</b> , Departamento de Química da Universidade de Aveiro <i>Dissociation reactions on metal catalysts: The role of a second metal</i>
12:00-12:30 h	<b>CC5.3 - João Paiva</b> , Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências da Universidade do Porto <i>Química, ensino e divulgação: surpresas de uma ciência central</i>	<b>CC2.10 - Luis C. Branco</b> , Departamento de Química, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa <i>Novel approaches for active pharmaceutical ingredients as functional ionic liquids</i>	<b>CC4.4 - Manuel E. Minas da Piedade</b> , Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa <i>Cohesive energy of protic ionic liquids</i>

12:30-13:00 h	CC5.4 - <i>João Paulo André</i> , Departamento de Química, Universidade do Minho <i>Química - Uma Ciência na Ficção Queiroziana</i>	CC2.11 - <i>Jacint Domènech</i> , Diretor Geral da Dow Portugal <i>A química como solução para os desafios da sociedade</i>	CC4.5 - <i>Igor Reva</i> , Departamento de Química, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade de Coimbra <i>Photochemical reactivity of heterocyclic molecules isolated in cryogenic inert matrices</i>
13:00-14:30 h	<b>Intervalo para almoço</b>		
<i>Sala</i>  <i>Chairperson</i>	23.1.5 Tema: Divulgação e educação em química  <i>Helder Gomes</i>	23.1.6 Tema: Interfaces da Química: saúde, segurança, alimentação, ambiente e energia  <i>Verónica Bermudez</i>	23.1.7 Tema: Novos produtos e materiais sustentáveis  <i>João Paulo André</i>
14:30-15:00 h	CC5.5 - <i>Paulo Ribeiro Claro</i> , Departamento de Química, Universidade de Aveiro <i>"Aprendizagem activa" em aulas teórico-práticas</i>	CC2.12 - <i>João Paulo Crespo</i> , Departamento de Química, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa <i>Engineering with membranes for bioprocessing</i>	CC1.8 - <i>Isabel Marrucho</i> , Instituto de Tecnologia Química e Biológica, Universidade Nova de Lisboa <i>Ionic liquids: New sustainable solutions for separation processes</i>
15:00-15:15 h	CO5.1 - <i>Paula Ornelas</i> , Escola Secundária Soares Basto, Rua General Humberto Delgado, Oliveira de Azeméis <i>Novos desafios no ensino da Química: As olimpíadas na motivação para o ensino da Química</i>	CO2.8 - <i>João Restivo</i> , Laboratório de Catalise e Materiais (LCM) Laboratório Associado LSRE/LCM, Departamento de Engenharia Química, Faculdade de Engenharia, Universidade do Porto <i>Stability and application of a structured catalyst to the ozonation of emerging organic micropollutants in natural water</i>	CO1.8 - <i>A.R. Silva</i> , Department of Chemistry, University of Aveiro <i>Asymmetric heterogeneous catalysis by copper(II) bis(oxazoline) immobilized onto porous solid supports</i>
15:15-15:30 h	CO5.2 - <i>Andreia Furtado</i> , Departamento de Metrologia, Instituto Português da Qualidade <i>Retas de calibração na metrologia química</i>	CO2.9 - <i>Cláudia G. Silva</i> , LCM - Laboratório de Catalise e Materiais - Laboratório Associado LSRE/LCM, Faculdade de Engenharia, Universidade do Porto <i>Hydrogen from water and biomass: a solar photocatalytic application</i>	CO1.9 - <i>Ana Lúcia Cardoso</i> , Department of Chemistry, University of Coimbra <i>The Neher approach to 2-(tetrazol-5-yl)-2H-azirines</i>
<i>Sala</i>  <i>Chairperson</i>	23.1.5 <i>Mário Nuno Berberan e Maria José Calhorda</i>	<b>Lição Prémio Vicente Seabra</b>	
15:30-16:00 h	<i>Pedro Góis</i> , Faculdade de Farmácia, Universidade de Lisboa <i>Catalysts or ligands! The dual life of N-heterocyclic carbenes</i>		
16:15-...	<b>Sessão de encerramento do congresso</b>		