

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

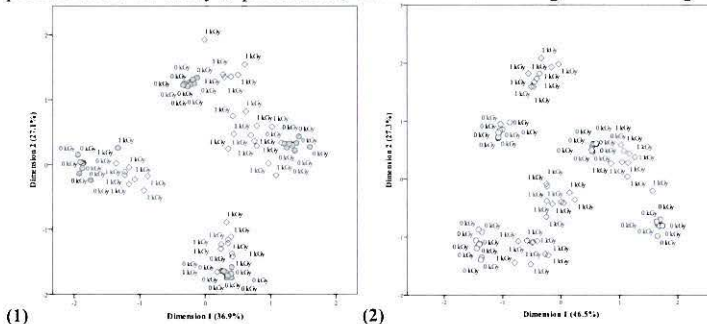
Reservados todos os direitos. Esta publicação não pode ser reproduzida ou transmitida, no todo ou em parte, por qualquer processo, eletrónico, mecânico, fotocópia, gravação ou outros, sem prévia autorização do Editor.

Gamma and electron beam irradiation as an alternative for postharvest treatment: a case study with chestnuts

Márcio Carocho,^a Amílcar L. Antonio,^{a,b,c} João C.M. Barreira,^{a,d} Lillian Barros,^a
Andrzej Rafalski,^e Albino Bento,^a Isabel C.F.R. Ferreira^a

^aMountain Research Center (CIMO), ESA, Polytechnic Institute of Bragança, Portugal; ^bIST/ITN Nuclear and Technologic Institute, Sacavém, Portugal; ^cDepartment of Fundamental Physics, University of Salamanca, Spain; ^dREQUIMTE, University of Porto, Portugal; ^eInstitute of Nuclear Chemistry and Technology, Warsaw, Poland; iferreira@ipb.pt

Chestnut fruits are an important food commodity in the Northeast region of “Trás-os-Montes”, representing an income of approximately 17 M€ and being Portugal one of the world’s biggest producer. Due to environmental concerns a broad spectrum fumigant, methyl bromide, was banned in 2010 by the European Union. Since then, no adequate postharvest treatment has been implemented, fostering research on suitable alternatives. Our research group has been testing gamma and electron beam irradiation as an alternative postharvest treatment for chestnuts. On a first attempt to evaluate the influence of irradiation, various doses were tested (0, 0.5, 1, 3 and 6 kGy) along different storage times (0, 30 and 60 days). The effects were assessed in the most important chemical parameters, namely nutritional, antioxidant, sugar, fatty acid, tocopherol, organic acid and triacylglycerol profiles, in which, all seemed to be altered to a greater extent by storage time than by the different doses. Another important conclusion was the validation of 1 kGy as the optimal dose for chestnuts conservation. This conclusion sustained the venture to extend the study to four varieties (*Longal*, *Judia*, *Cota* and *Palummina*) with a fixed dose of 1 kGy for both gamma radiation and electron beam. The results were processed through principal component analysis and confirmed that both gamma (1) and electron beam (2) irradiation showed high potential to be used as postharvest conservation technology. The most marked differences were found between the four different cultivars, especially *Cota* and *Palummina*, while non-irradiated and irradiated chestnuts proved to have very similar profiles in all the assayed parameters, with irradiation having an attenuating effect.



Acknowledgments: The authors are thankful to ON.2/QREN/EU Project No.13198/2010, for support. A.L.A., L.B. and J.C.M. B. thank FCT, POPH-QREN, and FSE for PROTEC/67398/2010, BPD/72802/2010 and BPD/4609/2008.

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 Nano Berberun e Maria José Calhorda</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>Armundo 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>Baltasar 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 Nanoforms: 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 Deus 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 glucosyl 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 TiO₂ 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 PDLCS</i>	CO2.2 - <i>Sónia 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-...	Assembleia geral da SPQ		
20:00-...	Recepção – Cantina Universitária do Crasto		

13 de junho – Quinta-feira

<p>Chairperson Sida 09:00-09:45 h</p>	<p>Artur Silva 23.1.5 PL2 - <i>Troels Skrydsrup</i>, Department of Chemistry, University of Aarhus, Denmark <i>Efficient Transition Metal Catalysis with Low Molecular Weight Gases</i></p>	<p>23.1.6 Tema: Interfaces da Química: saúde, segurança, alimentação, ambiente e energia Sérgio Sáez Melo</p>	<p>23.1.7 Tema: Novas tecnologias Mamilda R. Carrot CC3.4 - Pedro T. Gomes, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico <i>A new family of tunable luminescent tetraazadipine boron complexes: synthesis, characterisation and application in OLEDs</i></p>
<p>Sida</p>	<p>23.1.5 Tema: Novos produtos e materiais sustentáveis Joaquim Furia CC1.4 - Cristina Freire, 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 Sérgio Sáez Melo CC2.4 - Mamed António Câmara, Departamento de Química, Universidade de Aveiro <i>Polysaccharides chemistry: food applications</i></p>	<p>23.1.7 Tema: Novas tecnologias Mamilda R. Carrot CC3.4 - Pedro T. Gomes, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico <i>A new family of tunable luminescent tetraazadipine boron complexes: synthesis, characterisation and application in OLEDs</i></p>
<p>10:15-10:45 h</p>	<p>CC1.5 - Augusto Tomé, Departamento de Química, Universidade de Aveiro <i>Porphyrins and other tetrapyrrolic macrocycles: functionalization and applications</i></p>	<p>CC2.5 - Paula Margarida Ferreira, Departamento de Química, Universidade do Minho <i>New hydrogels based on small dehydropolymers for biomedical applications</i></p>	<p>CC3.5 - Adelto Mendes, Faculdade de Engenharia, Universidade do Porto <i>Dye Sensitized Solar Cells - New opportunity for building integrated PV</i></p>
<p>10:45-11:10 h</p>	<p>CC1.6 - Nuno Mateus, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade do Porto <i>Anthracyanin metabolites: chemical standards for biological studies</i></p>	<p>CC2.6 - Eduarda Fernandes, Faculdade de Farmácia, Universidade do Porto <i>Luminescence probes: Study of the modulatory effect of flavonoids on oxidative burst in human neutrophils</i></p>	<p>CC3.6 - Jorge Morgado, Departamento de Bioengenharia, Instituto Superior Técnico <i>Células solares orgânicas: a Química na procura de soluções energéticas sustentáveis</i></p>
<p>11:40-11:55 h</p>	<p>CC1.3 - Liliana C. Tomé, Instituto de Tecnologia Química e Biológica, Universidade Nova de Lisboa and CICECO, Departamento de Química, Universidade de Aveiro <i>Membranes based on polyionic liquids: new sustainable perspectives for CO₂ separation</i></p>	<p>CC2.3 - Filomena Martins, Departamento de Química e Bioquímica, Centro de Química e Bioquímica (COB), Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa <i>In the quest of new antitubercular drugs: when public health challenges chemistry</i></p>	<p>CC3.3 - Márcio Carocho, Mountain Research Center (CI-MO), ESA, Politécnico Institute of Braçança, Portugal <i>Gamma and electron beam irradiation as an alternative for postharvest treatment: a case study with chestnuts</i></p>
<p>11:55-12:10 h</p>	<p>CC1.4 - Ana Paula Paiva, Centro de Química e Bioquímica, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (DOB-FCI-L) <i>Extração líquido-líquido de plantar(II) de soluções clorretadas acídicas. Potencial aplicação à reciclagem de catalisadores antimovens em fim de vida</i></p>	<p>CC3.2 - Josef J. G. Moura, REQUIMTE-Departamento de Química, COFB, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa <i>Characterization of a novel Mo-Cu clusters in proteins synthesis of structural probe-clusters</i></p>	<p>CC3.4 - Carmen S. R. Freire, CICECO and Department of Chemistry, University of Aveiro <i>Functional hybrid nanocomposites: preparation strategies and applications</i></p>
<p>Sida Chairperson 12:10-12:55 h</p>	<p>23.1.5 José Cavaleiro PL3 - Vitor Ferreira, Presidente da Sociedade Brasileira de Química e Instituto de Química, Centro de Estudos Gerais, Universidade Federal Fluminense, Brasil <i>Os desafios da Química 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. Luízes Cristiano</p>	<p>23.1.7 Tema: Energética e reatividade Vitor Freitas</p>
<p>Sida Chairperson 14:30-15:00 h</p>	<p>23.1.5 Tema: Novos produtos e materiais sustentáveis José Cavaleiro CC1.7 - Anake Kijjou, Instituto de Ciências Biomédicas Abel Salazar, Universidade do Porto <i>Bioactive Secondary Metabolites from <i>Necosporina psalidifischeri</i></i></p>	<p>23.1.6 Tema: Interfaces da Química: saúde, segurança, alimentação, ambiente e energia M. Luízes Cristiano CC2.7 - Hermínio Sousa, Departamento de Eng. Química, Faculdade de Ciência e Tecnologia, Universidade de Coimbra <i>(Some) Green and Sustainable Approaches on the Development of Pharmaceutical and Biomedical</i></p>	<p>23.1.7 Tema: Energética e reatividade Vitor Freitas CC4.1 - Pedro Alexandrino Fernandes, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências da Universidade do Porto <i>Secrets behind Enzyme Reactivity Brought to Light by In</i></p>

		<i>Applications</i>	<i>Silico Simulations</i>
15:00-15:15h	CO1.5 - Ana M. L. Seca , Department of Chemistry & QOPNA, University of Aveiro and DCTD, University of Azores <i>Valuable compounds on conifers, macroalgae and halophyte species</i>	CO2.5 - Marisa Freitas , REQUIMTE, Departamento de Ciências Químicas, Laboratório de Química Aplicada, Faculdade de Farmácia, Universidade do Porto <i>Effect of acclimophen in human neutrophils' oxidative burst and lifespan in vitro</i>	CO4.1 - Nuno A. G. Bandeira , Institute of Chemical Research of Catalonia, ICIQ, and Department de Química Física i Inorgànica, Universitat Rovira i Virgili <i>Understanding the CO₂ sequestering ability of the spherical polyoxomolybdate [Mo₁₁]³⁻ – a computational perspective</i>
15:15-15:30h	CO1.6 - Jorge Saraiva , Departamento de Química, Universidade de Aveiro <i>High pressure - a new paradigm for food preservation processing and biotechnological applications?</i>	CO2.6 - Flávio Figueira , Department of Chemistry & QOPNA, University of Aveiro <i>Polymino-[28]hexaphyrins as anion binding agents</i>	CO4.2 - Jorge M. C. Marques , 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	CO1.7 - Ana M.R.B. Xavier , Department of Chemistry & CICECO, University of Aveiro <i>Cellulose based biorefinery for pulp and paper industry valorization</i>	CO2.7 - João C. M. Barreira , 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>	CO4.3 - Eliana S. Da Silva , 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		Visita ao Aliança Underground Museum	
20:00-		Jantar do Congresso - Cantina Universitária do Crasto	

14 de junho – Sexta-feira			
Sala Chairperson 09:00-09:45 h	23.1.5 João Rocha PL4 - Jacques Livage , Collège de France, Paris, France <i>Bio-inspired nanomaterials</i>		
Sala Chairperson	23.1.5 Tema: Divulgação e educação em química Hugh Douglas Burrows	23.1.6 Tema: Interfaces da Química: saúde, segurança, alimentação, ambiente e energia Artur Silva	23.1.7 Tema: Energética e reatividade João Coutinho
09:45-10:15 h	CC5.1 - Teixeira Dias , Departamento de Química, Universidade de Aveiro <i>Ensino de Química a alunos dos cursos de Ciências e Engenharias - Reflexões sobre experiência pessoal</i>	CC2.8 - Carlos Lodeiro , 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>	CC4.2 - Luís Belchior Santos , 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	Segunda sessão de comunicações em painel - discussão e intervalo para café		
11:30-12:00 h	CC5.2 - Raquel Gonçalves Maia , Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa <i>A torre das ciências</i>	CC2.9 - Paula Andrade , Faculdade de Farmácia da Universidade do Porto <i>Flavonoids: synergisms and antagonisms with glutathione</i>	CC4.3 - José R. B. Gomes , 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	CC5.3 - João Paiva , Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências da Universidade do Porto <i>Química, ensino e divulgação: surpresas de uma ciência central</i>	CC2.10 - Luís C. Branco , Departamento de Química, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa <i>Novel approaches for active pharmaceutical ingredients as functional ionic liquids</i>	CC4.4 - Manuel E. Minas da Piedade , 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	Intervalo para almoço		
<i>Sala</i>	23.1.5 Tema: Divulgação e educação em química	23.1.6 Tema: Interfaces da Química: saúde, segurança, alimentação, ambiente e energia	23.1.7 Tema: Novos produtos e materiais sustentáveis
<i>Chairperson</i>	<i>Helder Gomes</i>	<i>Verónica Bermudez</i>	<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 Murricho</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 Azeitões <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 Neber approach to 2-(tetrazol-5-yl)-2H-azirines</i>
<i>Sala</i>	Lição Prémio Vicente Seabra		
<i>Chairperson</i>	23.1.5 <i>Mário Nuno Berberan e Maria José Calhorda</i>		
15:30-16:00 h	<i>Pedro Goês</i> , Faculdade de Farmácia, Universidade de Lisboa <i>Catalysts or ligands? The dual life of N-heterocyclic carbenes</i>		
16:15-...	Sessão de encerramento do congresso		