

ENTIDADES ORGANIZADORAS

Departamento de Química, NEBIOQUE, NEBUÉ e Alunos da Licenciatura em Química

COMISSÃO ORGANIZADORA

António Teixeira

Cristina Galacho

Henrique Vicente

Jorge Teixeira

Margarida Figueiredo

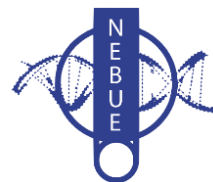
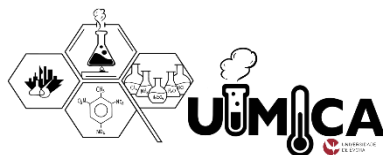
Paulo Mendes

Teresa Ferreira

Representantes do NEBIOQUE

Representantes do NEBUÉ

Representantes dos Alunos da Licenciatura em Química



TÍTULO

Jornadas do Departamento de Química 2018

EDITORES

António Teixeira, Cristina Galacho, Henrique Vicente, Jorge Teixeira, Margarida Figueiredo,

Paulo Mendes, Teresa Ferreira

DESIGN GRÁFICO

Sofia Santos

EDIÇÃO

Universidade de Évora

LOCAL, ANO DE PUBLICAÇÃO

Évora, 2018

ISBN

978-989-8550-56-9

ÍNDICE

APRESENTAÇÃO	1
ACERCA DO DEPARTAMENTO DE QUÍMICA	2
PROGRAMA	3
PALESTRAS CONVIDADAS	4
PC1. CANCRO DA MAMA, DA BIOQUÍMICA À CLÍNICA	5
PC2. BROMATOLOGIA/FOOD CHEMISTRY: DESAFIOS INTEMPORAIS.....	6
PC3. A EVOLUÇÃO DOS ESTADOS EXCITADOS DE MOLÉCULAS BIOLÓGICAMENTE ATIVAS	7
SHORT TALKS	8
ST1. DOENÇA DE ALZHEIMER: UM OLHAR SOBRE MECANISMOS BIOQUÍMICOS E ALVOS TERAPÊUTICOS	9
ST2. BIOLONIZAÇÃO DE MATERIAIS PÉTREOS	10
ST3. OS NANOMATERIAIS NA CONSERVAÇÃO DO PATRIMÓNIO CULTURAL: NANOCAIS PARA SUPORTES DE PINTURAS MURAIAS	11
ST4. PERDA DE INTEGRIDADE DO PÓLEN DE <i>CUPRESSACEAE</i> DURANTE O SEU TRANSPORTE AÉREO: IMPACTO DAS CONDIÇÕES ATMOSFÉRICAS	12
ST5. QUANTIFICAÇÃO DE ANTOCIANINAS E POTENCIAL ANTIOXIDANTE DE <i>VITIS VINIFERA</i> L. PRODUZIDAS NO ALENTEJO ..	13
ST6. SÍNTESE E ESTUDOS DE DOCKING DE COMPOSTOS BIOLÓGICAMENTE ACTIVOS.....	14
ST7. SÍNTESE DE NOVOS CORANTES FLUORESCENTES PARA MARCAÇÃO DE PROTEÍNAS E ÁCIDOS NUCLEICOS: APLICAÇÃO AO PATRIMÓNIO CULTURAL.....	15
ST8. MICRO-ONDAS: UM MÉTODO DE FIXAÇÃO DE LEVEDURAS RÁPIDO E EFICIENTE PARA ANÁLISE ATRAVÉS DE RNA-FISH	16
ST9. ANÁLISE DE CHUMBO EM TINTAS DE TATUAGEM ATRAVÉS DE MÉTODOS ELETROQUÍMICOS	17
ST10. REMOÇÃO DE METOMIL POR ADSORÇÃO EM CARVÕES ATIVADOS DE MADEIRAS DE EMBONDEIRO DE ORIGEM ANGOLANA	18
COMUNICAÇÕES EM POSTER	19
CP1. MISTURAS DE POLÍMEROS NATURAIS E SINTÉTICOS USADAS NA PRODUÇÃO DE CARVÕES ATIVADOS PARA UTILIZAÇÃO NA REMOÇÃO DE PESTICIDAS DA FASE LÍQUIDA	20
CP2. DESENVOLVIMENTO DE UM SISTEMA INTELIGENTE PARA AVALIAÇÃO DA QUALIDADE DA APRENDIZAGEM NA QUÍMICA GERAL	21
CP3. OS ESCARAVELHOS DA NECRÓPOLE DE VINHA DAS CALIÇAS 4, BEJA (PORTUGAL) – UM ESTUDO MICRO-ANALÍTICO	22
CP4. REMOÇÃO DE MERCÚRIO POR SÓLIDOS COM SUPERPODERES, OS CARVÕES ACTIVADOS.....	23
CP5. MASTITES CAPRINAS: UTILIZAÇÃO DO TESTE CALIFORNIANO DE MASTITES.....	24
CP6. PERIGO: PRODUTOS QUÍMICOS!	25
PELA SUA SEGURANÇA, E PELA DOS OUTROS, CONHEÇA OS NOVOS PICTOGRAMAS	25
CP7. AVALIAÇÃO DA ATIVIDADE ALGICIDA DE MACRÓFITAS PROVENIENTES DE MARROCOS CONTRA <i>MICROCYSTIS AERUGINOSA</i>	26
CP8. AVALIAÇÃO DA TOLERÂNCIA AO FUMO LÍQUIDO DE ESTAFILOCOCOS COAGULASE-NEGATIVOS ISOLADOS DE ENCHIDOS	27
CP9. SUBSTÂNCIAS ANABOLIZANTES NO DESPORTO: IMPLICAÇÕES BIOLÓGICAS, BIOPATOLÓGICAS E JURÍDICAS DA DOPAGEM	28
CP10. WALK ON THE <i>WINE</i> SIDE	29
CP11. REMOÇÃO DE COMPOSTOS FENÓLICOS PROBLEMÁTICOS NA ÁREA VINÍCOLA POR ADSORVENTES COMERCIAIS	30
CP12. COMPLEXOS ORGANOMETÁLICOS DE RUTÉNIO COM ACTIVIDADE ANTICANCERÍGENA	31
CP13. COMPLEXOS ORGANOMETÁLICOS DE RUTÉNIO COM POTENCIAIS APLICAÇÕES EM NLO: ESTUDO POR DFT	32
CP14. MELHORIA DA PRODUÇÃO DE PASTAGENS EM SOLOS ÁCIDOS NO MONTADO: MECANISMOS BIOQUÍMICOS DO TRIGO	33
CP15. SÍNTESE E AVALIAÇÃO DA POTENCIAL ATIVIDADE BACTERIANA DE DERIVADOS DE QUITOSANO.....	34
CP16. DESENVOLVIMENTO DE NOVOS MATERIAIS COM PROPRIEDADES BIOCIDAS PARA APLICAÇÃO COMO CONSOLIDANTES EM PATRIMÓNIO	35
CP17. APLICAÇÃO DE CONSÓRCIOS DE LEVEDURAS IMOBILIZADAS EM DIFERENTES SUPORTES.....	36

CP18. A CONCENTRAÇÃO ATMOSFÉRICA DE PROTEÍNA COMO INDICADOR DA CARGA ALERGÉNICA NO AR: RELEVÂNCIA PARA O DESENVOLVIMENTO DE SISTEMAS DE ALERTA.....	37
CP19. AVALIAÇÃO DO CONTEÚDO FENÓLICO E DO POTENCIAL ANTIOXIDANTE DE EXTRATOS DE <i>VITIS VINIFERA</i> L.	38
CP20. CONVERSÃO DE α -PINENO NA PRESENÇA DE HETEROPOLIÁCIDOS IMOBILIZADOS EM SBA-15	39
CP21. A UTILIZAÇÃO DE ISÓTOPOS ESTÁVEIS NA AVALIAÇÃO DE PALEODIETAS: A FAUNA E OS HUMANOS DO COMPLEXO ARQUEOLÓGICO DOS PERDIGÕES (REGUENGOS DE MONSARAZ, PORTUGAL)	40
CP22. NOVAS ABORDAGENS PARA DETEÇÃO DE CONTAMINANTES MICROBIANOS DA CORTIÇA	41
CP23. CARACTERIZAÇÃO INORGÂNICA DE COGUMELOS AMANITA PONDEROSA: ABORDAGEM EM <i>DATA MINING</i>	42
CP24. ÂMBAR PRÉ-HISTÓRICO EM PORTUGAL: UM ESTUDO DE PROVENIÊNCIA.....	43
CP25. SÍNTESE DE FOSFONATOS E AVALIAÇÃO DA SUA ATIVIDADE ANTI-INFLAMATÓRIA E ANTIOXIDANTE.....	44
CP26. AVALIAÇÃO DA INFLUÊNCIA DOS ENZIMAS MICROBIANOS NA PRODUÇÃO DE ARROZ COM BAIXO TEOR DE ARSÉNIO	45
CP27. APLICAÇÃO DA TÉCNICA HIBRIDAÇÃO <i>IN SITU</i> FLUORESCENTE (FISH) EM MICRORGANISMOS QUE DETERIORAM O PATRIMÓNIO CULTURAL.....	46
CP28. MECANISMOS DE AÇÃO ANTIMICROBIANA E ANTIOXIDANTE DE ÓLEOS ESSENCIAIS DE <i>LAVANDULA</i> SPP. E <i>THYMUS</i> SPP. DO ALENTEJO.....	47
CP29. MODELOS DA MEMBRANA DO HIV: UMA ABORDAGEM <i>COARSE-GRAINED</i>	48
CP30. <i>VILLA</i> ROMANA DE HORTA DA TORRE: ESTUDO DAS ARGAMASSAS.....	49
CP31. ALTERAÇÃO CROMÁTICA DE CALCÁRIOS ORNAMENTAIS	50
CP32. IDENTIFICAÇÃO DE LIGANTES PROTEICOS EM PINTURAS DE CAVALETE POR MARCAÇÃO FLUORESCENTE	51
CP33. REMOÇÃO DE SULFOMETOXAZOL POR ARGILAS EM LCM	52
WORKSHOPS.....	53
W1. PROPRIEDADES NUTRACÊUTICAS DA DIETA MEDITERRÂNICA: POTENCIAL ANTIOXIDANTE E ANTI-INFLAMATÓRIO ...	54
W2. A GRANDE VITÓRIA! (E UM CASO DE MORTE VIOLENTA)	54
W3. MÉTODOS ALTERNATIVOS DE DIVULGAÇÃO CIENTÍFICA: JOGOS DE TABULEIRO.....	55
W4. APLICAÇÃO DA TÉCNICA DE RMN NA DETERMINAÇÃO DA ESTRUTURA DOS COMPOSTOS	55
W5. A IMPORTÂNCIA DA QUALIDADE E DA SEGURANÇA DOS ALIMENTOS NO MUNDO	56
W6. EMPREENDEDORISMO E INOVAÇÃO	56
W7. INTRODUÇÃO À PROGRAMAÇÃO EM PYTHON PARA MANIPULAÇÃO E VISUALIZAÇÃO DE DADOS	57
W8. ATENÇÃO! NÃO SEJAS UM PERIGO! VEM CONHECER AS REGRAS BÁSICAS DE SEGURANÇA EM LABORATÓRIOS.....	57
W9. IMPÉRIO DOS SENTIDOS: FILME DE UMA VIAGEM SENSORIAL À VOLTA... DO VINHO	58
ÍNDICE DE AUTORES.....	59

APRESENTAÇÃO

A realização das Jornadas do Departamento de Química constitui já uma tradição, tendo existido edições anteriores em 2006, 2010 e 2013. Em qualquer uma das edições o objetivo principal tem sido proporcionar aos alunos uma oportunidade de conhecer melhor o Departamento, a sua oferta formativa e a investigação científica, fundamental ou aplicada, que nele se desenvolve.

Esta edição de 2018 é, pela primeira vez, uma organização conjunta do Departamento de Química da ECT da Universidade de Évora, dos Núcleos de Estudantes de Bioquímica (NEBIOQUE) e de Biotecnologia (NEBUE) e dos alunos da Licenciatura em Química.

Mantivemos a designação de “Jornadas do Departamento de Química” porque, na verdade, o que une os três cursos é o Departamento no qual desejamos que todos os alunos se sintam verdadeiramente integrados.

Através da participação ativa dos alunos na organização pretendemos ir de encontro aos seus interesses, quer na escolha dos temas das Palestras Convidadas, quer na seleção e organização de um conjunto diversificado de workshops.

Fazemos votos de que estas Jornadas sejam um espaço dinâmico de interação, científica e social, entre alunos, docentes, não-docentes e investigadores.

ACERCA DO DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

O Departamento de Química é uma subunidade da Escola de Ciências e Tecnologia da Universidade de Évora. O seu corpo docente é atualmente constituído por 31 docentes (1 professor catedrático, 1 professor associado com agregação, 3 professores associados, 2 professores auxiliares com agregação e 24 professores auxiliares). Integra ainda 1 investigador auxiliar e 8 funcionários não-docentes.

É responsável pelos cursos de 1º ciclo em Bioquímica, Biotecnologia e Química; de 2º ciclo em Análises Químicas Ambientais, Bioquímica, Química e Química em Contexto Escolar e pelos Programas de Doutoramento em Bioquímica e Química.

Os docentes estão integrados em diversos Centros de Investigação (CQE, HERCULES, ICAAM, ICT, MARE) e desenvolvem a sua investigação em áreas muito diversificadas, no âmbito de Projetos aprovados em diversos Programas de financiamento nacionais e internacionais.

A integração nos trabalhos de investigação de alunos que estão a fazer o Estágio de Licenciatura, a dissertação de Mestrado ou a Tese de doutoramento é uma realidade que enriquece os ensinamentos ministrados no Departamento.

O Departamento de Química desenvolve ainda regularmente intensa atividade no domínio da divulgação e extensão universitária, através de uma estreita colaboração de muitos dos seus membros com as Escolas da região, de todos os níveis de ensino.

Para mais informação consulte o sítio na internet:

<http://www.dquim.uevora.pt/>

e a nossa página do Facebook: *2011 Ano Internacional da Química Universidade de Évora*

PROGRAMA

09:00 - Receção aos participantes

09:30 - Sessão de abertura

09:45 - Palestra Convidada – Dr. Rui Dinis - HES

Cancro da mama, da bioquímica à clínica

10:30 - *Coffee Break* & Sessão de Posters

11:00 - *Short talks*

12:15 - Palestra Convidada – Professora Doutora M. Beatriz Oliveira - REQUIMTE/LAQ, FF. UP

Bromatologia / Food Chemistry: Desafios Intemporais

13:00 - Almoço Livre

14:30 - Palestra Convidada - Professor Doutor Adelino Galvão - CQE, IST.UL

A evolução dos estados excitados de moléculas biologicamente ativas

15:15 - *Short talks*

16:30 - *Coffee Break* & Sessão de Posters

17:00 - Prémio de Mérito da SPQ e Encerramento

17:15 - Workshops

20:30 - Jantar Convívio

PALESTRAS CONVIDADAS

PC1. Cancro da mama, da bioquímica à clínica

Rui Dinis

Hospital do Espírito Santo de Évora (ruidini@gmail.com)

A classificação e o diagnóstico de cancro da mama começaram por ser feitos unicamente tendo por base a anatomia patológica, mas o advento da imuno-histoquímica e da biologia molecular trouxe novos conhecimentos sobre a doença que a reclassificaram e levaram à descoberta de medicamentos personalizados, o que mudou radicalmente o curso natural do cancro da mama, cuja taxa de cura passou de 50% para 80% em menos de três décadas.

PC2. Bromatologia/Food Chemistry: Desafios intemporais

M. Beatriz P. P. Oliveira

REQUIMTE/LAQV, Universidade do Porto, Faculdade de Farmácia, Departamento de Ciências Químicas (beatoliv@ff.up.pt)

A ciência dos alimentos, à semelhança doutros domínios, tem tido uma evolução surpreendente. Apesar disso, os problemas colocados aos investigadores/indústria continuam os do passado (controlo da qualidade e segurança) mas com uma complexidade aumentada pelos novos desafios associados à sustentabilidade ambiental e social, à disponibilidade de alimentos para todos (*food security*), à redução do desperdício e à valorização de subprodutos da indústria alimentar e da agricultura e, ainda, os problemas associados às alterações climáticas. Simultaneamente, os consumidores tornaram-se mais interessados na sua saúde e bem-estar e na prevenção de doenças crónicas com a alimentação, tendo vindo a aumentar a exigência quanto aos produtos alimentares que adquirem.

Nesta palestra serão apresentados exemplos de trabalhos de investigação desenvolvidos nos tópicos anteriormente referidos, nomeadamente: o estudo de fontes alternativas de proteína, mais sustentáveis, para responder à disponibilidade crítica no futuro deste nutriente para alimentação humana; a valorização de plantas autóctones (frutos, flores, diferentes partes de plantas) como forma de melhorar a sustentabilidade ambiental e económica e obter valor de matérias-primas não valorizadas; valorização de subprodutos da indústria alimentar como forma de obter sustentabilidade económica e reduzir o material descartado para aterros, respondendo à estratégia da economia circular. Toda esta abordagem pretende igualmente responder às expectativas dos consumidores, que pretendem ingredientes naturais em aplicações inovadoras. Serão ainda referidos alguns constrangimentos impostos pela legislação no avanço de alguns dos trabalhos desenvolvidos no âmbito da sustentabilidade.

O que parece incontestável é que as práticas sustentáveis deverão ser obrigatórias para conseguirmos ter alimentos disponíveis para toda a população.

[1] Bessada, S., Alves, R.C., Oliveira, M.B.P.P. (2018) Coffee silverskin: a review on potential cosmetic applications. *Cosmetics*, 5, 5, 11 pág. doi:10.3390/cosmetics5010005

[2] Puga, H., Alves, R.C., Costa, A.S., Vinha, A.F., Oliveira, M.B.P.P. (2017). Multifrequency multimode modulated technology as a clean, fast, and sustainable process to recover antioxidants from a coffee by-product. *Journal of Cleaner Production* 168, 14-21.

[3] Pinto, D., Rodrigues, F., Braga, N., Santos, J., Pimentel, F.B., Palmeira-de-Oliveira, A., Oliveira, M.B.P.P. (2017). *Castanea sativa* bur as a new potential ingredient for nutraceutical and cosmetic outcomes: preliminary studies. *Food and Function*, 8, 201-208.

PC3. A evolução dos estados excitados de moléculas biologicamente ativas

Adelino M. Galvão

*Centro de Química Estrutural, Instituto Superior Técnico (IST), Universidade de Lisboa, Lisboa, Portugal
[adelino@ist.utl.pt]*

Em moléculas biologicamente ativas é frequente que os seus estados excitados sejam reativos (fotoquímica) e que a sua evolução seja condicionada pela topologia da Superfície de Energia Potencial (SEP) do estado excitado. A Interceção Cónica (IC) tem-se revelado uma das características topológicas mais importantes e condicionante da evolução dos estados excitados. Sendo ubíqua em sistemas biologicamente ativos a teoria das IC's será apresentada com ênfase na sua importância para os processos não radiativos que conduzem à obtenção de foto-produtos. Em particular serão apresentados casos de estudo sobre o seu papel em sistemas fotocromáticos (cromenos), foto-isomerização de moléculas biológicas (antocianinas e índigos) e motores moleculares (cânfora hidrazonas).

Short Talks

ST1. Doença de Alzheimer: um olhar sobre mecanismos bioquímicos e alvos terapêuticos

Patrícia Bacalhau⁽¹⁾, Anthony J. Burke^(1,2), A. Teresa Caldeira^(2,3), M^o. Rosário Martins^(2,3)

(1) Centro de Química de Évora, Universidade de Évora (pbacall@gmail.com)

(2) Departamento de Química, Universidade de Évora

(3) Laboratório HERCULES, Universidade de Évora

As doenças neurodegenerativas, nomeadamente a doença de Alzheimer, é um enorme desafio quer para a medicina quer em termos de saúde pública devido à sua prevalência nos países desenvolvidos [1]. Assim, a pesquisa de terapias para doenças neurodegenerativas deve ser baseada na compreensão da sua patogénese molecular e bioquímica [2].

Foi desenhada uma biblioteca de 74 compostos de diferentes famílias baseada na sua capacidade de inibir a atividade de acetilcolinesterase e butirilcolinesterase, alvos terapêuticos da doença de Alzheimer. A avaliação toxicológica e farmacológica dos compostos sintetizados mais promissores foi efetuada utilizando dois modelos biológicos diferentes, A. salina e ratinho Swiss [3]. O composto cloreto de 4-[(3-hidroxi-2-oxo-3-fenilindolin-1-il)metil]piperidínio foi testado *ex vivo* em homogenatos de hepatócito de murganho Swiss, tendo apresentado valores de IC50 de 594.64 μM e de 434.51 μM para as atividades de acetilcolinesterase e butirilcolinesterase, respetivamente. A capacidade inibitória deste composto foi também avaliada *in vivo* após administração interperitoneal de 3 mg kg^{-1} e 6 mg kg^{-1} em ratinhos Swiss, utilizando donepezilo (3 mg kg^{-1}) como padrão. Os resultados mostraram que o composto sintetizado apresentou valores de inibição de atividade de acetilcolinesterase no cérebro superiores aos observados para o donepezilo, podendo indicar que a sua captação pelos tecidos cerebrais poderá ser efetuada de modo semelhante à do donepezilo [3].

[1] Hippus, H., Neundörfer, G., The discovery of Alzheimer's disease. *Dialogues in Clin. Neurosci.*, 2003. 5(1): p. 101-108.

[2] Blennow, K., de Leon, M. J., Zetterberg, H., Alzheimer's disease. *Lancet seminars*, 2006. 368 (9533): p. 387-403.

[3] Patrícia Bacalhau (2017) Tese de doutoramento, Universidade de Évora.

ST2. Biocolonização de materiais pétreos

Tânia Rosado ⁽¹⁾, Mara Silva ⁽¹⁾, Luís Dias ^(1,2), José Mirão ^(1,3), António Candeias ^(1,2), Ana Teresa Caldeira ^(1,2)

(1) Laboratório HERCULES - Universidade de Évora (tsr@uevora.pt)

(2) Departamento de Química da ECT - Universidade de Évora

(3) Departamento de Geociências da ECT - Universidade de Évora

Portugal possui um enorme espólio de bens patrimoniais edificados em pedra, sendo o Convento de Cristo em Tomar um exemplar de excelência. Este emblemático monumento, classificado como Património Mundial, integra alguns dos mais expressivos testemunhos pétreos da história da arquitetura portuguesa, encontrados nos diversos Claustros e Janela Manuelina. Estes locais, apresentam evidentes alterações como manchas, formação de biofilmes e danos estruturais, sendo necessário perceber a sua origem [1]. Assim, este trabalho envolveu uma abordagem multidisciplinar de forma a compreender os fenómenos que induzem a alteração destes materiais arquitetónicos e implementação de estratégias de mitigação que eliminem e previnam a sua recolonização. As microanálises (MEV-EDS, μ -Raman, FTIR-ATR) permitiram sinalizar a presença de contaminação microbiológica, sendo estes resultados corroborados pelas técnicas de cultura dependente e Sequenciação de Nova Geração. A presença de bactérias, cianobactérias e leveduras foi detectada nas zonas com manchas rosa/laranja. As zonas alteradas com coloração verde encontram-se essencialmente colonizadas por fungos filamentosos e algas, sendo os responsáveis pelos biofilmes verdes-esbranquiçados [2,3]. Atendendo à enorme incidência de agentes microbiológicos, foi necessário delinear uma estratégia que promova a sua erradicação. Assim, ensaios antimicrobiológicos com biocidas comerciais e naturais, produzidos no Laboratório HERCULES, foram testados contra os diversos fungos filamentosos isolados do Convento de Cristo. Elevados níveis de inibição foram obtidos, evidenciando-se a enorme eficácia de inibição dos compostos naturais. Estas novas soluções biotecnológicas representam uma óptima alternativa e solução inovadora para o biocontrolo e eliminação de comunidades complexas que usualmente colonizam bens edificados em pedra, contribuindo assim para a preservação e salvaguarda da nossa Herança Cultural.

Este trabalho foi co-financiado pelo pela União Europeia através do Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional - ALENTEJO 2020 através dos projectos COLOURSTONE (ALT20-03-0145-FEDER-000017) e MEDUSA (ALT20-03-0145-FEDER-000015).

[1] Rosado T, Silva M, Galvão A, Mirão J, Candeias A and Caldeira AT (2016) A first insight on the biodegradation of limestone: the case of the World Heritage Convent of Christ, Applied Physics A, 122(12), 1012-1018.

[2] Korkanç M, Savran A (2015) Impact of the surface roughness of stones used in historical buildings on biodeterioration, Construction and Building Materials, 80, 279-294.

[3] Scheerer, O. Ortega-Morales, C. Gaylarde (2009) Chapter 5 Microbial Deterioration of Stone Monuments—An Updated Overview, 66, 97-139.

ST3. Os nanomateriais na conservação do património cultural: nanocais para suportes de pinturas murais

P. I. Girginova ^(1,2), C. Galacho ^(1,3), J. Mirão ^(1,4), R. Veiga ⁽²⁾, A. S. Silva ⁽²⁾, A. Candeias ^(1,3)

(1) Laboratório HERCULES, Universidade de Évora (penka@uevora.pt)

(2) Laboratório Nacional de Engenharia Civil (LNEC)

(3) Departamento de Química da ECT, Universidade de Évora

(4) Departamento de Geociências da ECT, Universidade de Évora

Nas últimas décadas os nanomateriais têm sido vistos como uma boa alternativa de materiais para a preservação do Património Cultural [1], nomeadamente, como consolidantes de pedra e de argamassas de cal. Estes materiais apresentam propriedades distintas quando comparados com os tradicionais.

O trabalho que tem vindo a ser desenvolvido no Laboratório HERCULES em parceria com o LNEC [2,3] compreende a preparação de nanomateriais consolidantes inovadores, à base de cal, compatíveis com as superfícies originais e eficazes a longo prazo, tendo sempre em consideração a minimização dos fatores de risco ambiental e humano.

Nesta comunicação serão apresentadas e discutidas diferentes estratégias para a obtenção de nanopartículas de hidróxidos de metais alcalino-terrosos, nomeadamente, as condições experimentais de síntese. Adicionalmente serão apresentados e discutidos os resultados de estudos de eficiência das dispersões de nanocais preparadas quando aplicadas em provetes de argamassas de cal.



Agradecimentos: Este trabalho foi desenvolvido no âmbito do projeto “HIT3CH - HERCULES Interface for Technology Transfer and Teaming in Cultural Heritage”, Ref: ALT20-03-0246-FEDER-000004 co-financiado pela União Europeia através do Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional, ALENTEJO 2020

[1] Piero Baglioni, Emiliano Carretti and David Chelazzi (2015) Nanomaterials in art conservation. Nature Nanotechnology, 10 APR, 287-29

[2] P.I. Girginova, C. Galacho, J. Mirão, R. Veiga, A.S. Silva, A. Candeias (2016) Estudos preliminares para consolidação de suportes com pintura mural: síntese e caracterização de nanocais. Conservar património, 23, 103-107.

[3] G. Borsoi, B. Lubellia, R. van Hees, R. Veiga, A.S. Silva (2016) Understanding the transport of nanolime consolidants within Maastricht limestone. Journal of Cultural Heritage, 18, 242-249.

ST4. Perda de integridade do pólen de *Cupressaceae* durante o seu transporte aéreo: impacto das condições atmosféricas

Ana Galveias ⁽¹⁾, Rui Salgado ⁽²⁾, Daniele Bortoli ⁽²⁾, Rute Arriegas ⁽¹⁾, Ana R Costa ⁽¹⁾, Maria J Costa ⁽²⁾, Célia M Antunes ⁽¹⁾

(1) ICT - Instituto de Ciências da Terra, IIFA & Departamento de Química, Escola Ciências Tecnologia, Universidade de Évora, Évora, Portugal (anagalveias@gmail.com)

(2) ICT - Instituto de Ciências da Terra, IIFA & Departamento de Física, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora, Évora, Portugal

A família *Cupressaceae* inclui diversas espécies. O período de polinização destas plantas encontra-se compreendido entre o final do inverno e o início da primavera, dependendo da temperatura, sendo consideradas uma elevada preocupação para alguns países da Europa [1]. As espécies de *Cupressaceae* que predominam em Portugal são *Cupressus lusitânica* e *Cupressus sempervirens* (Serra de Sintra, Gerês e Serra do Buçaco). O pólen de *Cupressaceae* apresenta uma forma esferoidal (25-30 μm), exina fina, intina estratificada, inaperturado e citoplasma centrado [2]. As suas características aerobiológicas ainda não se encontram caracterizadas na região de Évora. O objetivo deste trabalho é a caracterização aerobiológica do pólen de *Cupressaceae* em Évora, durante 2017 e a sua relação com as circulações atmosféricas e condições meteorológicas obtidas a partir de observações locais e de modelos numéricos de previsão meteorológica. O pólen de *Cupressaceae* foi colhido a partir de uma metodologia padrão *Hirst type* e identificado ao microscópio ótico pelo método tradicional [3]. Foi também calculado trajetórias de massa de ar de 12h a partir do modelo HYSPLIT, utilizando o movimento vertical e computadorizadas às 12:00 e às 15:00 UTC em diferentes alturas. Foram encontradas elevadas concentrações do pólen de *Cupressaceae*, com um pico a 25 de fevereiro de 2017. Foi também observado uma elevada concentração deste tipo polínico lisado, com valores entre 18% e 50% em diferentes dias da amostragem. Estes resultados coincidem com percentagens de humidade relativa superiores a 70%. As trajetórias de massa de ar demonstraram que o pólen era maioritariamente de origem local. Este é o primeiro relato de uma fração considerável de grãos de pólen da família *Cupressaceae* com perda de integridade morfológica. Como consequência, existe a libertação de todo o conteúdo celular uma vez que a sua parede externa é corrompida.

[1] Shahali, Y., Poncet, P., & Sénéchal, H. (2013). Pollinose aux Cupressacées et pollution atmosphérique. *Cupressaceae* pollinosis and air pollution. *Revue Française D'allergologie*, 53(5), 468–472;

[2] Gaussorgues, R., & Demoly, P. (2013). Environnement et allergies: la pollinose des Cupressacées. *Revue Française D'allergologie*, 53, 65–68;

[3] www.REA.com

ST5. Quantificação de antocianinas e potencial antioxidante de *vitis vinifera* L. produzidas no Alentejo

M^o Inês Rouxinol ⁽¹⁾, M^o Rosário Martins ⁽²⁾, João Mota Barroso ⁽³⁾, Ana Elisa Rato ⁽³⁾

(1) IIFA – Instituto de Investigação e Formação Avançada & ICAAM – Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas, Universidade de Évora (mir@uevora.pt)

(2) Departamento de Química & Laboratório HERCULES –Herança Cultural, Estudos e Salvaguarda, Universidade de Évora, 7000-809 Évora.

(3) Departamento de Fitotecnia & ICAAM – Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas, Universidade de Évora, Pólo da Mitra, Ap. 94, 7002-554 Évora, Portugal.

As antocianinas são pigmentos naturais presentes nas uvas de castas tintas. Estes compostos têm tido um interesse crescente uma vez que para além de serem de extrema importância para a qualidade do vinho, também existem evidências de possuírem potencial anti tumoral, cardioprotector e neuroprotector [1,2].

O principal objetivo deste trabalho foi elaborar um método rápido de avaliação do teor de antocianinas com recurso a espectroscopia UV-Vis em uvas das castas Syrah e Aragonês, colhidas na Herdade da Morgada, em Borba. Os valores obtidos foram validados com os resultados obtidos por HPLC-DAD2. Os níveis de antocianinas obtidos foram também relacionados com o potencial antioxidante de cada casta, avaliado pelos métodos do radical DPPH, poder redutor total e sistema β -caroteno/ácido linoleico [3].

Os resultados evidenciaram as diferenças entre a quantificação rápida por espectroscopia UV-vis e a quantificação por HPLC-DAD. A casta Syrah foi a que apresentou um maior conteúdo em antocianinas totais, bem como um maior potencial antioxidante do que a casta Aragonês.

[1] Georgiev, V., Ananga, A. & Tsoleva, V. (2014). Recent advances and uses of grape flavonoids as nutraceuticals. *Nutrients* 6, 391–415.

[2]. Antonioli, A., Fontana, A. R., Piccoli, P. & Bottini, R. (2015). Characterization of polyphenols and evaluation of antioxidant capacity in grape pomace of the cv. Malbec. *Food Chem.* 178, 172–178.

[3] Arantes S., Piçarra A., Candeias F., Teixeira D., Caldeira A.T., Martins M.R. (2017) Antioxidant activity and cholinesterase inhibition studies of four flavouring herbs from Alentejo, *Natural Product Research*, 31 (18): 2183-2187.

ST6. Síntese e estudos de docking de compostos biologicamente activos

L. Fernandes⁽¹⁾, J. Totobenazara⁽⁵⁾, E. P. Carreiro^(1,2), P. Bacalhau^(1,4), C. Marques^(1,2), A. Goth⁽²⁾, A. S. Joan⁽²⁾, A. T. Caldeira^(1,4), M. R. Martins^(1,4), R. C. Guedes⁽³⁾, A. J. Burke^(1,2)

(1) Departamento de Química, Universidade de Évora, Escola de Ciências e Tecnologia, Rua Romão Ramalho, 59, 7000 Évora, Portugal; (nachteldar@gmail.com)

(2) Centro de Química de Évora, Universidade de Évora;

(3) Instituto de Investigação do Medicamento – iMed.UL, Faculdade de Farmácia da Universidade de Lisboa, Av. Prof. Gama Pinto, 1649-003 Lisboa, Portugal;

(4) Laboratório HERCULES, Universidade de Évora, Évora, Portugal;

(5) Northern Institute for Cancer Research Medicinal Chemistry Laboratories, Bedson building, Newcastle University, Newcastle upon Tyne, NE17RU.

O *design*, a síntese, ensaios de inibição e de toxicidade, bem como estudos de *docking* incluindo modelação por homologia de proteínas foram efetuados para α -glucosidasas de *S.cerevisae* e *Rattus norvegicus* (intestinal) com análogos de desoxinojirimicina (DNJ) and 1,4-didesoxi-1,4-imino-D-arabitol (DAB-1). Estes estudos produziram conhecimento estrutural e funcional relevante sobre os ligandos e os enzimas em questão, tendo já sido publicados.

A verificação de uma interessante relação estrutural entre ftalimidas e uma família de indolinonas [1] com atividade inibitória em acetil- e butirilcolinesterases e, portanto, com forte interesse clínico, conduziu à síntese, ensaios de inibição, estudos de *STD-NMR* e de *docking* de análogos de indolinona nos referidos enzimas, estudos esses também já publicados [1-6].

Além dos supracitados estudos, foi encontrada robusta indicação computacional de atividade inibitória dual em colinesterases e α -glucosidasas, bem como de atividade inibitória em Monoaminoxidase B (MAO-B) para alguns dos compostos sintetizados, informação que será objeto de apresentação.

Agradecimentos: E. Carreiro e C. Marques agradecem o generoso apoio financeiro da FCT respetivamente às bolsas de pós-doutoramento (SFRH/BPD/72182/2010) e (SFRH/BPD/92394/2013).

[1] N. S. H. N. Moorthy, M. J. Ramos, P. A. Fernandes, J. Chemolab. 2011, 109 101-112.

[2] Vine, K. C., Lake, J. M., Ronson, M., Pyne, S. G., Bremner, B. Bioorg. Med. Chem, 2007, 15, 931-938.

[3] Ellman, G.; Courtney, K.; Andres, V.; Featherstone, R.; Biochemical Pharmacology, 1961. 7, p. 88.

[4] Bacalhau, P.; Joan, A.S.; Marques, C.; Peixoto, D.; Burke, A.J.; Caldeira, A.; Martins, M.R. Neurodegener Dis.. 2015, 15 (suppl 1) 741.

[5] Yvain Nicolet, Oksana Lockridge, Patrick Masson, Juan C. Fontecilla-Camps and Florian Nachon J. Biol. Chem. 2003 Vol. 278, No. 42, Issue of October 17, pp. 41141–41147.

[6] Jane Totobenazara, Patrícia Bacalhau, Amor A. San Juan, Carolina S. Marques, Luís Fernandes, Albertino Goth, A. Teresa Caldeira, M. Rosário Martins, Anthony J. Burke ChemistrySelect, 2016, 1, 3580–3588.

ST7. Síntese de novos corantes fluorescentes para marcação de proteínas e ácidos nucleicos: Aplicação ao património cultural

Sérgio Martins⁽¹⁾, Ana T. Caldeira^(1,2), António Pereira^(1,2)

(1) Laboratório HERCULES, Universidade de Évora, Portugal (sergiomartins@gmail.com)

(2) Departamento de Química, Escola de Ciência e Tecnologia, Universidade de Évora, Évora, Portugal

As coumarinas constituem uma das mais importantes classes de materiais orgânicos fluorescentes e têm um papel vital nos dispositivos electroluminescentes. Os derivados das coumarinas têm vindo a tornar-se num dos grupos de materiais orgânicos fluorescentes mais promissores e com crescente importância comercial [1]. Um dos principais problemas na expansão das aplicações dos derivados das coumarinas reside no seu espectro de cores e na intensidade das suas bandas espectroscópicas. Uma das soluções consiste no aumento da deslocalização do sistema de electrões π conjugados para a obtenção de derivados de coumarinas com bandas de absorção a maiores comprimentos de onda e com maior intensidade [1,2]. Os bens do património cultural estão continuamente expostos à degradação física, química e biológica, sendo que os microrganismos são os agentes biológicos que mais contribuem para a sua deterioração [3]. O desenvolvimento de novas estratégias que detetem a contaminação microbiana é urgente, com o intuito de planear estratégias eficazes de prevenção e conservação dos bens patrimoniais. Por outro lado, sendo os bens patrimoniais maioritariamente construídos por materiais heterogéneos, com matrizes complexas onde as proteínas são componentes minoritários, é difícil a sua deteção e identificação, sendo necessário recorrer a técnicas altamente especializadas para o efeito. Neste trabalho descreve-se a síntese de novos derivados de coumarinas fluorescentes solúveis em água e de baixo custo para marcação de biomoléculas presentes em bens patrimoniais.

Agradecimentos: FCT pelo financiamento da Bolsa de doutoramento SFRH/BD/128807/2017.

[1] a) Schiedel, M. et al. (2001), *Angew. Chem. Int. Ed.*, 40, 4677-4680; b) Wilze, K.; Johnson (2007), A. *Handbook of Detergents, Chemistry, Production and Application of Fluorescent Whitening Agents*, Part F: Production; CRC Press, Taylor & Francis: Boca Raton.

[2] Martins, S.; Branco, P.; Torre, M.; Sierra, M.; Pereira, A. (2010), *Synlett*, 19, 2918-2922.

[3] a) Berner, M. et al. (1997), *Int. Biodeterior. Biodegrad*, 40, 53-61; b) Pepe, O. et al. (2010) *Microbiol. Res.*, 165, 21-32; c) Zucconi, L. et al. (2012) *Int. Biodeterior. Biodegrad*, 70, 40-46.

ST8. Micro-ondas: um método de fixação de leveduras rápido e eficiente para análise através de RNA-FISH

Marina González-Pérez ⁽¹⁾, Ricardo Vieira ⁽¹⁾, António Pereira ^(1,2), António Candeias ^(1,2), Ana Teresa Caldeira ^(1,2)

(1) Laboratório HERCULES, Universidade de Évora (marinagp@uevora.pt)

(2) Departamento de Química da Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora

A Hibridação *In Situ* Fluorescente (FISH) é uma técnica com um elevado potencial para analisar células de microrganismos que se encontram em comunidades microbianas em matrizes complexas [1]. Esta técnica tem sido muito utilizada em análise e monitorização microbiológica e os protocolos habitualmente incluem a fixação das células [2], que é um dos passos mais importantes e morosos. Torna-se assim importante encurtar os protocolos existentes.

O objetivo deste trabalho foi investigar a implementação de um método de fixação rápido e eficiente compatível com a aplicação da técnica RNA-FISH que, preservando as células e mantendo as suas características, permita: i) a sua análise através de microscopia de epifluorescência e citometria de fluxo; e ii) melhore os resultados obtidos na técnica FISH. A fixação celular diretamente com micro-ondas ou assistida por elas tem demonstrado preservar a morfologia das células e o conteúdo celular [3]. Por isso, neste trabalho, foram estudados e comparados os efeitos da utilização de dez métodos de fixação (químicos, baseados na fixação com micro-ondas, assistidos por micro-ondas ou combinados) nos resultados dos ensaios FISH realizados em células de leveduras. Os métodos utilizados foram comparados considerando o tempo de fixação requerido e os resultados obtidos após a aplicação da técnica FISH, através de microscopia e citometria de fluxo.

Os resultados revelaram que a fixação diretamente com micro-ondas é a alternativa mais eficaz para analisar células de leveduras através de RNA-FISH em suspensão, obtendo células com elevada intensidade de fluorescência sem necessidade de utilizar fixantes químicos e reduzindo o tempo de fixação a 30s. No entanto, para amostras contendo um reduzido número de células, foi concluído que o método de fixação combinada (fixação química com etanol seguida de fixação assistida por micro-ondas) é a melhor alternativa, apesar de ser mais demorado (71 min). Estes resultados poderão vir a contribuir para a otimização dos protocolos RNA-FISH aplicados na análise e monitorização de células de leveduras em diferentes áreas.

Agradecimentos: Este trabalho foi co-financiado pela FCT através dos projetos MICROTECH-ART e as bolsas SFRH/BD/118028/2016 e SFRH/BPD/100754/2014 e pela União Europeia através dos fundos de Desenvolvimento Regional Europeus ALENTEJO 2020, projeto MEDUSA- ALT20-03-0145-FEDER-000015.

[1] Amann R.I., Ludwig W., Schleifer K.H. (1995). *Microbiol. Rev.*, 59, 143–169.

[2] Yilmaz S., Haroon M.F., Rabkin B.A., Tyson G.W., Hugenholtz P. (2010). *ISME J.*, 4, 1352–1356.

[3] May E., Jones M., Mitchell J., May E., Jones M., Mitchell J. (2008) *Royal Society of Chemistry, Cambridge.*

ST9. Análise de chumbo em tintas de tatuagem através de métodos eletroquímicos

Bruna Ramos, Jorge Ginja Teixeira

Departamento de Química/ECT & HERCULES Lab., Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho nº59, 7000-671 Évora, Portugal. (bruna.alexandra.amos@gmail.com)

A prática de tatuagens tem sido adotada ao longo de vários séculos em todo o mundo, assumindo diferentes significados que variam de cultura para cultura. Além disso, exames epidemiológicos realizados nas últimas décadas têm mostrado que esta prática de expressão corporal tem aumentado na Sociedade contemporânea [1].

Em tatuagens e maquiagem permanentes, os pigmentos, entre outros constituintes das tintas, são dispostos na derme com recurso a uma agulha. Este processo garante à partida a imobilização dos pigmentos e a relativa estabilidade das áreas tatuadas [2].

Entre os componentes das tintas, os principais compostos corados são sais ou compostos de coordenação metálicos, que incluem alguns elementos químicos com propriedades adversas bem conhecidas para os seres vivos [1], mesmo que presentes em pequenas quantidades.

Sabendo que a instrumentação e as técnicas eletroanalíticas oferecem inúmeras vantagens, na análise de elementos químicos presentes em quantidades vestigiárias [3], apresenta-se neste trabalho uma metodologia eletroquímica simples e rápida para a análise eficaz de chumbo em tintas de tatuagem. O trabalho faz parte de uma investigação mais ampla. Tanto quanto se sabe, a aplicação de metodologias eletroquímicas na análise de tintas de tatuagem não é conhecida.

[1] Forte, G., Petrucci, F., Cristaudo, A. & Bocca, B. Science of the Total Environment Market survey on toxic metals contained in tattoo inks, *Sci. Total Environ.* 407 (2009) 5997–6002.

[2] Jacobsen, E., Tønning, K., Pedersen, E., Bernth, N., Serup, J., Høgsberg, T., Nielsen, E., Chemical Substances in Tattoo Ink., Survey of chemical substances in consumer products, Miljøstyrelsen, no. 116 (2012).

[3] Bakker A., Electrochemical Sensors, *Anal. Chem.* 76 (2004) 3285-3298.

ST10. Remoção de metomil por adsorção em carvões ativados de madeiras de embondeiro de origem angolana

E. F. Tchikuala^(1,2), P. A. M. Mourão⁽¹⁾, J. M. V. Nabais⁽¹⁾

(1) Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Centro de Química de Évora, Universidade de Évora

(2) Departamento de Ciências Exactas, Universidade Katçavala Bwila, Benguela, Angola (tchikuala@hotmail.com)

Neste trabalho é apresentada a produção de carvões ativados a partir de novos precursores, designadamente os desperdícios das madeiras produzidas em Angola (região de Benguela), e sua aplicação na remoção de soluções aquosas do poluente metomil, um herbicida de amplo uso na agricultura.

Os desperdícios de madeira de Embondeiro foram triturados em fragmentos de tamanho até 3 mm antes da pré-lavagem com uma solução aquosa de H₂SO₄. A suspensão foi filtrada e o restante sólido lavado com água destilada e seco a 110°C. A produção de carvões ativados foi feita no forno tubular horizontal por ativação com dióxido de carbono a 800°C. A caracterização das amostras foi realizada por adsorção de nitrogênio a 77K, difração de raios X, análise elementar, densidade, FTIR, ponto de carga zero e análise termogravimétrica. A adsorção de metomil a partir de fase líquida foi realizada a 25°C, num banho termostaticado com agitação e um tempo de contacto de 24h. A determinação da concentração de metomil foi efectuada por espectrofotometria UV/Visível a 233nm [1].

O precursor apresenta densidade de 1,5076 cm³ e teor de celulose, hemicelulose e lignina 36,9; 9,2 e 7,4% (m/m), respetivamente. Por FTIR foi possível observar nos carvões ativados produzidos a presença de grupos funcionais tais como amina, alceno, álcool, fenol e carboxilos. Os carvões ativados apresentaram um bom desenvolvimento da estrutura porosa com área superficial aparente e volume poroso até 1148 m²/g e 0,52 cm³/g, respetivamente e áreas externas abaixo de 65 m²/g. A largura média dos poros situou-se no intervalo de 0,74 e 1,69 nm. Os materiais produzidos são de carácter básico com ponto de carga zero (pzc) até 8,5, valor coerente com o teor de oxigênio das amostras. A natureza básica das amostras é relevante para a adsorção do metomil, a qual tem um valor máximo de 125 mg/g.

Os autores agradecem à Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT, Portugal) o financiamento concedido no âmbito do projeto PEst-OE/QUI/UI0619/2014. Tchikuala, E.F., agradece a bolsa de estudo concedida pelo governo da República de Angola; Fundação Calouste Gulbenkian (Doutoral Grant nº146128 “Bolsas de apoio à investigação para estudantes de doutoramento dos PALOP”). Centro de Química de Évora e Departamento de Química da Universidade de Évora.

[1] Mourão, P.A.M.; Laginhas, C.; Custódio, F.; Nabais, J.M.V.; Carrott, P.J.M.; Ribeiro CarrottM.M.L; Fuel Processing Technology 2011,92, 241-246.

[2] Marsh, H.; Rodríguez-Reinoso, F. Activated Carbon Elsevier Science & Technology Books, 2006.

[3] Thommes, M., Kaneko, K., Neimark, A., Olivier, J.P., Rodriguez-Reinoso, F., Rouquerol, J., Sing, K.S.W.: Physisorption of gases, with special reference to the evaluation of surface area and pore size distribution (IUPAC Technical Report). Pure Appl. Chem. 87(9-10) (2015) 1051–1069.

COMUNICAÇÕES EM POSTER

CP1. Misturas de polímeros naturais e sintéticos usadas na produção de carvões ativados para utilização na remoção de pesticidas da fase líquida

C. R. Belo ^(1,2), I. P. P. Cansado ⁽¹⁾, P. A. M. Mourão ⁽¹⁾

(1) Centro de Química de Évora, Instituto de Investigação e Formação Avançada, Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora, Portugal; (cristovaoramiro64@gmail.com)

(2) Faculdade de Educação, Artes e Humanidades, Departamento do Ensino de Química, Universidade Nacional Timor-Lorosa'e, Dili, Timor-Leste

A utilização de desperdícios naturais provenientes da agricultura ou de origem sintética provenientes de várias fileiras industriais, e também da sociedade em geral, para a produção de materiais adsorventes, com as propriedades idênticas às dos comerciais, é uma oportunidade de obter carvões ativados (CA) a partir de precursores de baixo valor económico.

Os precursores sintéticos utilizados neste trabalho foram o politereftalato de etileno (PET) e as fibras de poliacrilonitrilo (PAN). O PET é um excelente precursor, pois contém um elevado teor de carbono (cerca de 62,5%), o PAN é utilizado na produção de fibras de carbono, possibilitando a obtenção de um rendimento mais elevado [1]. A serradura da teca (T), polímero natural, que é um desperdício da indústria madeireira, apresenta um alto teor de carbono, cerca de 50%, apresentando-se como um precursor natural excelente para a produção de CA [2].

Os CA podem ser produzidos com recurso a duas formas de ativação: física e química [3]. Neste estudo foram utilizadas misturas binárias de polímeros sintéticos e teca, para a produção de CA, com recurso à ativação química com KOH e K₂CO₃ em proporção variáveis.

As designações dos CA seguem a seguinte nomenclatura, por exemplo T-PET-KOH 1-2, T-PET-K₂CO₃ 1-2, T-PAN-KOH 1-2 e T-PAN- K₂CO₃ 1-2. Estas misturas foram submetidas a taxa de aquecimento de 5 Kmin⁻¹ até uma temperatura de 573 K, à qual permaneceram 60 min. Posteriormente, foram submetidos a uma rampa de 10 Kmin⁻¹ até 973 K. Os CA foram caracterizados com recurso à adsorção de nitrogénio a 77 K. A análise das isotérmicas obtidas permitiu a determinação das áreas superficiais que variaram entre 332 e 501 m²g⁻¹, o volume poroso total que variou entre 0.13 e 0.19 cm³g⁻¹, com poros cujo diâmetro médio variou entre 1.17 e 1.44 nm. Alguns CA foram selecionados e aplicados na remoção de dois pesticidas, o MCPA e o 2,4-D. As capacidades de adsorção máxima para o MCPA variaram entre 0.27 e 1.36 mmolg⁻¹ e para o 2,4-D entre 0.26 e 1.03 mmolg⁻¹. Os resultados obtidos permitem inferir das elevadas potencialidades de aplicação dos vários CA em diferentes áreas, com relevância para a remoção de pesticidas da fase líquida.

[1] C.R. Belo, I.P.P. Cansado e P.A.M. Mourão. Environ. Technol., 2017, 38:3, 285-296.

[2] I.P.P. Cansado, C.R. Belo e P.A.M. Mourão. Biosourc. Technol., 2018, 249: 328-333.

[3] G.G. Stavropoulos. Fuel Proces. Technol., 2005, 86: 1165-1173.

CP2. Desenvolvimento de um sistema inteligente para avaliação da qualidade da aprendizagem na Química Geral

Margarida Figueiredo ⁽¹⁾, José Neves ⁽²⁾, Henrique Vicente ⁽³⁾

(1) Departamento de Química, ECT, CIEP, Universidade de Évora, Évora, Portugal (mtf@uevora.pt)

(2) Centro Algoritmi, Universidade do Minho, Braga, Portugal

(3) Departamento de Química, ECT, CQE, Universidade de Évora, Évora, Portugal

Nas Sociedades contemporâneas, cada vez mais dependentes da tecnologia, os cursos de natureza tecnológica em diferentes áreas, têm assumido uma importância crescente. As instituições de Ensino Superior têm procurado corresponder a esse desafio formando profissionais competentes e multifacetados, capazes de resolver problemas e tomar decisões de forma integrada e sustentável. Qualquer curso orientado para o desenvolvimento destas competências globais exige a introdução, no seu planos de estudos, de conteúdos de áreas muito diversas, entre as quais a Química. Contudo, estes conteúdos nem sempre estão adequados aos conhecimentos prévios dos estudantes e nem sempre são introduzidos da forma mais adequada aos objetivos que se pretendem alcançar. Alguns estudos mostram que os estudantes encaram a Química Geral como uma disciplina difícil e sem interesse, o que compromete o papel que ela deve desempenhar na sua formação [1,2]. Promover uma aprendizagem efetiva e de qualidade que contribua para o desenvolvimento das competências necessárias no futuro profissional dos estudantes constitui, portanto, um grande desafio para os professores. Assim, neste trabalho apresenta-se um Sistema de Apoio à Decisão desenvolvido para avaliar a Qualidade da Aprendizagem na Química Geral, a partir de fatores que a podem condicionar, tais como os conteúdos, os professores e os alunos. O enquadramento formal é baseado em Programação em Lógica, complementado com uma abordagem computacional que utiliza Redes Neurais Artificiais. Esta metodologia possibilitou o tratamento de informação incompleta, desconhecida ou contraditória, permitindo fornecer respostas adequadas, apresentando uma acuidade global superior a 90%.

[1] Coe, R., Searle, J., Barmby, P., Jones, K., Higgins, S. (2008) Report for SCORE – Science Community Supporting Education. <http://www.cem.org/attachments/score2008report.pdf>

[2] Rodríguez, R.M., Corona, L.B., Ibáñez, M.V. (2015) Cooperative learning in the implementation of teaching chemistry (didactic instrumentation) in engineering in México. *Procedia – Social and Behavioral Sciences*, 174, 2920–2925

CP3. Os escaravelhos da necrópole de vinha das caliças 4, Beja (Portugal) – Um estudo micro-analítico

Mafalda Costa ^(1,2), Ana Margarida Arruda ⁽³⁾, Rui Barbosa ⁽⁴⁾, Pedro Barrulas ⁽¹⁾, Peter Vandenabeele ⁽²⁾, José Mirão ^(1,5)

(1) Laboratório HERCULES, Universidade de Évora, Portugal (mcosta@uevora.pt)

(2) Departamento de Arqueologia, Universidade de Ghent, Bélgica

(3) UNIARQ – Centro de Arqueologia da Universidade de Lisboa, Portugal

(4) Arqueohoje, Portugal

(5) Departamento de Geociências, Universidade de Évora, Portugal

Cinco escaravelhos e um escarabóide, encontrados na necrópole da Idade do Ferro (século VI a.C.) de Vinha das Caliças 4 (Beja, Portugal), foram estudados usando uma metodologia não-destrutiva e micro-analítica, com o intuito de determinar a sua composição química e mineralógica. Os seis amuletos foram analisados com recurso a fluorescência de raios-X portátil (FRX), a microscopia electrónica de varrimento acoplada à espectroscopia dispersiva de raios-X (MEV-EDS) e a micro-difracção de raios-X (μ -DRX).

A caracterização química e micro-estrutural revelou que estes amuletos são objectos de faiança, sendo compostos por um corpo branco de areia feldspática coberto por um vidro azul-esverdeado, rico em chumbo e pobre em metais alcalinos, mostrando sinais evidentes de deterioração. Os resultados de MEV-EDS, FRX e μ -DRX permitiram ainda determinar que a cor azul-esverdeada do vidro se deve à utilização conjunta de iões de cobre (Cu^{2+}), que dão uma tonalidade turquesa ao vidro, e de bindheimite, um antimonato de chumbo de cor amarela que é também um opacificante. Pequenas partículas de estanho foram detectadas na estrutura da bindheimite apontando para a utilização de um óxido ternário Pb-Sb-Sn, nunca antes identificado em objectos produzidos antes do século XV. O estanho, muito provavelmente adicionado com o cobre (raspas de bronze), poderá ter servido de centro de nucleação para o crescimento da bindheimite.

Os resultados são consistentes com os cinco escaravelhos e o escarabóide terem sido produzidos no Egipto. Este estudo, sendo o primeiro estudo arqueométrico de escaravelhos encontrados na Península Ibérica, poderá contribuir para a compreensão das rotas comerciais do Mediterrâneo e da influência do mundo Mediterrânico no Atlântico durante o segundo milénio a.C..

CP4. Remoção de mercúrio por sólidos com superpoderes, os carvões activados

J. M. Valente Nabais, C. Laginhas, A. Ramires

Universidade de Évora, Departamento de Química, Centro de Química de Évora (jvn@uevora.pt)

O mercúrio continua a ser um dos poluentes mais relevantes pelo seu potencial tóxico e de bioacumulação. Os compostos de mercúrio podem ser absorvidos através do tracto gastrointestinal e também pela pele e pulmões. Após a absorção existe a acumulação no fígado, rins, cérebro e ossos levando a sérios problemas de saúde tais como paralisia, disfunções do sistema nervoso central e, no limite, à morte. É, portanto, necessário garantir que os compostos de mercúrio não entrem na cadeia alimentar. Um dos métodos mais eficazes para a sua remoção de cursos de água é por adsorção em carvões activados. É objectivo deste trabalho o desenvolvimento de carvões activados a partir de resíduos agrícolas para a remoção de mercúrio de soluções aquosas.

De resíduos a carvões activados – a transformação!

Foram usados como precursores videira, endocarpo de café e casca de amêndoas e activação com dióxido de carbono a 700 e 800°C. A porosidade e a química superficial dos materiais produzidos foram determinadas pelos métodos tradicionais. Foi testada a adsorção a 25°C de 3 compostos de mercúrio que mimetizam os normalmente encontrados em cursos de água (Hg^{2+} , HgCl_2 e $[\text{HgCl}_4]^{2-}$).



Os superpoderes dos carvões activados produzidos!

Os carvões activados produzidos são todos de natureza básica com pH do ponto de carga zero entre 9 e 11 com a presença na superfície dos seguintes grupos funcionais: aldeído, cetona, carbonilo, pirona, fenol e álcool. Todas as amostras possuem uma estrutura porosa desenvolvida com uma rede de microporos com volume poroso entre 0.32 e 0.53 cm³/g e uma área superficial aparente entre 598 e 1173 m²/g. Só por curiosidade, e agora que somos campeões Europeus, 1173 m²/g significa que 1g de uma das amostras produzidas, V870, tem como área superficial o equivalente a um campo e meio de futsal!

A capacidade máxima de adsorção foi de 1104, 584 e 204 para Hg^{2+} , HgCl_2 e $[\text{HgCl}_4]^{2-}$, respectivamente.

Os autores agradecem à FCT e FEDER (projecto PTDC/CTM/66552/2006) o financiamento.

CP5. Mastites caprinas: Utilização do teste californiano de mastites

F. Grosso ⁽¹⁾, N. P. C. Andrade ⁽²⁾, M. C. Queiroga ⁽³⁾

(1) Universidade de Évora, (m40856@alunos.uevora.pt)

(2) Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas, Universidade de Évora

(3) Departamento de Medicina Veterinária, Escola de Ciências e Tecnologia e Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas, Universidade de Évora

A mastite é uma patologia que está diretamente relacionada com perdas de produção, decréscimo da qualidade do leite, elevados custos na terapêutica e com problemas para a saúde pública. Esta afeição pode apresentar a forma clínica – mastite clínica (MC), e subclínica – mastite subclínica (MSC). O diagnóstico de MC tem por base a observação de alterações no úbere e /ou alterações no aspeto característico do leite. Para o diagnóstico de MSC, faz-se uma análise ao leite. O método de diagnóstico mais utilizado é o Teste Californiano de Mastites (TCM) [1].

Foi realizado um estudo em cinco explorações com efetivos caprinos, em que os tipos de ordenha praticados foi a ordenha manual ou mecânica. Efetuou-se o TCM em 308 metades mamárias, respeitantes a 158 animais, tendo sido consideradas positivas todas as amostras com reação 1+ ou superior. Os resultados do TCM foram posteriormente comparados com os resultados das respetivas análises bacteriológicas, para avaliar a utilização do TCM como indicador de infeção intramamária (IMI) em cabras [2].

A prevalência de mastite, designadamente MSC, nas cabras é elevada (47,4%). Os resultados obtidos em 308 amostras de leite revelaram 146 resultados positivos 1+, 2+, 3+ e MC. A percentagem de reações positivas ao TCM nos efetivos ordenhados manualmente foi 36,9%, tendo sido 52,7% nos efetivos sujeitos a ordenha mecânica. Os resultados indicaram a reação 1+ como ponto “cut-off” mais indicado para interpretação do TCM. Porém um elevado número de amostras com TCM positivo não revelaram a presença de bactérias. Estes resultados, parecem indicar que no tipo de ordenha mecânica a probabilidade de ocorrerem casos de mastite é superior. O TCM revelou não ser um bom indicador de infeções intramamária em cabras. No entanto é uma excelente opção para uma análise rápida, de fácil execução e pouco dispendiosa, que se pode realizar antes da ordenha.

[1] RADOSTITS, O.M.; Gay, C.C.; Blood, D.C. e Hinchcliff, K.W. (2000). Veterinary Medicine (9ª edição). Ed: W.B. Saunders. ISBN: 0-7020-26042.

[2] THRUSFIELD, M. (1999). Veterinary epidemiology (2ª edição). Ed: Blackwell Science Ltd. ISBN: 0632-04851-4

CP6. Perigo: produtos químicos!

Pela sua segurança, e pela dos outros, conheça os novos pictogramas

Cristina Galacho

Laboratório HERCULES, IFFA, Departamento de Química da ECT, Universidade de Évora (pcg@uevora.pt)

Certamente que já reparou que no rótulo de alguns produtos de uso quotidiano, como por exemplo, detergentes para a loiça, assim como, no rótulo de todos os produtos químicos se encontram um ou mais pictogramas de perigo. Desde de 1 de junho de 2017 que todos os produtos colocados no mercado têm de obedecer às novas regras de classificação, rotulagem e embalagem estabelecidas no regulamento (CE) n.º1272/2008 do Parlamento Europeu e do Conselho mais conhecido por CLP (do inglês, Classification, Labelling and Packaging) ou por CRE (do português, Classificação, Embalagem e Rotulagem). Este regulamento europeu define 28 classes de perigo: 16 classes de perigo físico, 10 classes de perigo para a saúde, 1 classe de perigo ambiental e 1 classe suplementar relativa a perigo para a camada de ozono. Por sua vez, as classes de perigo ainda estão divididas em categorias de perigo, que especificam a gravidade do perigo.

O CLP estabelece ainda que os rótulos, principal fonte de informação dos perigos e único instrumento de comunicação destinado aos consumidores finais, têm de incluir os novos pictogramas de perigo. Um pictograma de perigo não é mais do que uma composição gráfica que inclui um símbolo e outros elementos gráficos, tais como um bordo, um motivo de fundo ou uma cor, destinado a transmitir informações específicas sobre o perigo em causa. Para informação mais detalhada consultar: <http://www.spq.pt/magazines/BSPQuimica/670/article/30001991/pdf>

Perigo físico



Inflamável



Comburente



Explosivo



Gás sob pressão

Perigo para a saúde



Perigo para a saúde



Corrosivo



Toxicidade aguda



Perigo grave para a saúde

Perigo para o ambiente



Perigoso para o ambiente

CP7. Avaliação da atividade algicida de macrófitas provenientes de Marrocos contra *microcystis aeruginosa*

Zakaria Tazart ^(1,2), Mountasser Douma ⁽²⁾, Lamiaa Tebaa ⁽²⁾, Khadija Mouhri ⁽²⁾, Ana Teresa Caldeira ⁽¹⁾, Loudiki Mohammed ⁽²⁾

(1) Laboratório HERCULES & Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora. [zakaria.tazart@gmail.com]

(2) Laboratório de Biologia e Biotecnologia de Microorganismos (LBBM), Faculdade de Ciências de Semlalia, Cadi Ayyad Universidade de Marrakesh. Marrocos.

Microcystis aeruginosa é uma espécie de cianobactéria que pode formar floração (*Harmful Algal Blooms - HABs*) em reservatórios de água doce em todo o mundo [1]. A presença destas cianobactérias está associada a um conjunto de fatores ambientais que ao sofrerem alterações podem levar ao aparecimento de florações, caracterizadas pelo intenso crescimento destas cianobactérias tóxicas na água [2]. O uso de macrófitas para controlar algas nocivas por inibição alelopática poderá constituir uma solução promissora e ambientalmente amigável. No presente estudo, examinámos extratos aquosos de diferentes macrófitas provenientes de Marrocos: *Ceratophyllum demersum*, *Elodea canadensis*, *Nasturtium sp.*, *Nasturtium officinale*, *Potamogeton natans* e *Ranunculus aquatilis* e avaliou-se a sua ação na inibição do crescimento da espécie de cianobactéria *Microcystis aeruginosa*. Os ensaios de inibição de *M. aeruginosa* mostraram que os extratos das macrófitas testadas podem inibir significativamente o crescimento de *M. aeruginosa*. Uma Análise de correlação mostrou que a densidade celular de culturas destas cianobactérias expostas a macrófitas está correlacionada com os níveis de fenóis totais, flavonoides e taninos nessas macrófitas.

Os resultados deste trabalho sugerem que o uso de macrófitas pode oferecer um elevado potencial na gestão sustentável de águas doces, reduzindo o crescimento excessivo de algas.

[1] Harke, M.J., Steffen, M.M., Gobler, C.J., Otten, T.G., Wilhelm, S.W., Wood, S.A., Paerl, H.W., 2016. A review of the global ecology, genomics, and biogeography of the toxic cyanobacterium, *Microcystis* spp. *Harmful Algae* 54, 4–20. doi:10.1016/j.hal.2015.12.007

[2] Loudiki, M., Oudra, B., Sabour, B., Sbiyyaa, B., Vasconcelos, V., 2002. Taxonomy and geographic distribution of potential toxic cyanobacterial strains in Morocco. *Ann. Limnol. - Int. J. Limnol.* 38, 101–108. doi:10.1051/limn/2002008

CP8. Avaliação da tolerância ao fumo líquido de estafilococos coagulase-negativos isolados de enchidos

S. Conceição ⁽¹⁾, M. J. Fraqueza ⁽²⁾, M. Elias ^(3,4), M. Laranjo ^(3,5)

(1) Departamento de Química, Universidade de Évora, Ap. 94, 7006-554 Évora (m39590@alunos.uevora.pt)

(2) Centre for Interdisciplinary Research in Animal Health (CIISA), Faculdade de Medicina Veterinária, Universidade de Lisboa, Av. da Universidade Técnica, Polo Universitário, Alto da Ajuda, 1300-477 Lisboa

(3) Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas, Universidade de Évora, Ap. 94, 7006-554 Évora

(4) Departamento de Fitotecnia, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora, Ap. 94, 7006-554 Évora

(5) Instituto de Investigação e Formação Avançada (IIFA), Universidade de Évora, Ap. 94, 7006-554 Évora

A indústria de produtos cárneos produz uma grande diversidade de enchidos tradicionais em Portugal e noutros países do Mediterrâneo. Atualmente, os consumidores são cada vez mais informados e exigentes, preferindo produtos regionais caseiros de elevada qualidade sensorial, pelo que se torna necessário melhorar sua qualidade. Uma abordagem possível consiste no uso de culturas de arranque, como os Estafilococos Coagulase-Negativos (ECN) ou as Bactérias do Ácido Lático (BAL), para garantir a segurança e melhorar a qualidade nutricional e sensorial. Os ECN, como *Staphylococcus xylosus* ou *S. equorum*, estão naturalmente presentes em níveis elevados, nos enchidos e em ambientes industriais. Além disso, os microrganismos devem ser selecionados de acordo com os processos usados na indústria de produtos cárneos, nomeadamente o uso de uma etapa de fumagem. No entanto, pouco se sabe sobre como os ECN toleram a fumagem. Neste estudo, usaram-se ECN, porque possuem algumas características organolépticas desejadas pelos consumidores, como a promoção da cor vermelha dos enchidos, e são bactérias geralmente consideradas como seguras. Este trabalho consistiu na determinação da Concentração Mínima Inibitória (CMI) para uma coleção de isolados de ECN, a fim de estudar sua resistência ao fumo líquido. A maioria destes ECN são moderadamente resistentes ao fumo líquido, no entanto alguns conseguem crescer a uma concentração de 100 µl/mL. Com base nestes resultados e considerando propriedades tecnológicas importantes destes ECN, será feita uma seleção de estirpes a serem usadas como culturas de arranque na produção de enchidos.

Este trabalho foi financiado por Fundos Nacionais através da FCT-Fundação para a Ciência e a Tecnologia no âmbito do Projeto UID/AGR/00115/2013 e da bolsa de Pós-Doutoramento SFRH/BPD/108802/2015 (M. Laranjo).

CP9. Substâncias anabolizantes no desporto: Implicações biológicas, biopatológicas e jurídicas da dopagem

António Amorim⁽¹⁾, Paulo Ferreira Gomes⁽²⁾

(1) Biologia Humana, Universidade de Évora, Évora, Portugal; {aamorim.pt@gmail.com }

(2) Direito Penal, Instituto Universitário Egas Moniz, Monte de Caparica, Portugal

De acordo com a Agência Mundial Antidopagem (AMA), um dos grupos de substâncias de utilização proibida por praticantes desportivos é o grupo dos agentes anabolizantes.

Os efeitos anabólicos destas substâncias incluem aumento do anabolismo e diminuição do catabolismo proteico, aumento da produção de glóbulos vermelhos via estimulação da eritropoietina, aumento da deposição óssea do cálcio, aumento da velocidade da curva de crescimento e favorecimento da capacidade de recuperação muscular. Do ponto de vista de efeitos secundários patológicos salientam-se aparecimento de amenorreia na mulher e atrofia testicular no homem, conduzindo ambos à esterilidade, surgimento de patologias hepáticas, hipertrofia benigna da próstata e tumores malignos da próstata, aumento da predisposição para o aparecimento de doenças cardiovasculares, de entre outros. A utilização de esteroides anabolizantes por praticantes desportivos, sem autorização terapêutica emitida por autoridades competentes, do ponto de vista jurídico, pode estar associada a ilícito criminal, ilícito de mera ordenação social ou ilícito disciplinar. O ilícito criminal prevê penas de prisão com uma moldura penal de 6 meses a 5 anos. O ilícito de mera ordenação social ou contraordenação prevê coimas entre 5 e 98 unidades de conta processuais. O ilícito disciplinar prevê penas de suspensão da prática desportiva por períodos entre 2 e 4 anos, bem como invalidação ou anulação de resultados obtidos em competição, retirada de medalhas pontos e prémios.

De acordo com os dados disponibilizados publicamente pela Autoridade Antidopagem de Portugal (ADoP), entre 2003 e 2014, as substâncias químico-farmacêuticas anabolizantes foram um dos grupos com maior expressão de entre as substâncias proibidas utilizadas pelos praticantes de desporto em Portugal. Têm representado entre 9 a 25% dos casos de utilização de substâncias proibidas, só ultrapassadas pelos canabinóides. A utilização dos anabolizantes no desporto, pelo potencial de efeitos secundários patológicos que representam e, sobretudo, pelo enviesamento à verdade desportiva que permitem obter e pelos ilícitos associadas, representa um problema de saúde pública e um problema no desporto de dimensões incontornáveis.

[1] Chostowski K, Kozera J, Grucza R (2000) Medical consequences of anabolic steroids. *Biol. of Sport*, Vol. 17 (2).

[2] Lei 38/2012, de 28 de agosto.

[3] Parssinen M, Seppala (2002) Steroid use and long-term health risks in former athletes. *Sports Med*, 32:83-94.

[4] World Anti-Doping Agency (2017) The World Anti-Doping Code, Prohibited List, WADA, Canadá.

[5] <http://www.adop.pt/estatistica/dados-estatisticos.aspx>

CP10. Walk on the *wine* side

Paulo J. Mendes

Centro de Química de Évora, Instituto de Investigação e Formação Avançada, Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora, Portugal (pjgm@uevora.pt)

De acordo com a lei, *o vinho é um produto obtido exclusivamente pela fermentação alcoólica total ou parcial da uva fresca, pisada ou não, ou então do mosto de uvas frescas, que deve ser bebível e adequada para o consumo, elaborada conforme a lei.* Do ponto de vista de um Bioquímico, de um Enólogo, ou de alguém com formação em Biotecnologia, *o vinho pode ser considerado como uma bebida resultante da fermentação pelas leveduras, e também em certos casos pelas bactérias lácticas, do sumo do esmagamento ou maceração das uvas.* Já um Químico diria que *o vinho é uma mistura, muito complexa, de compostos químicos numa solução hidroalcoólica com pH próximo de 3 e que vai deixando desvendar os seus segredos à medida que se vai estudando e se refinam os métodos analíticos.* O vinho também tem sido definido de forma poética ou romanceada uma vez que é um tema recorrente na literatura, tendo servido de inspiração a numerosos autores. Por exemplo, Ernest Hemingway referiu que *o vinho é uma das coisas materiais mais civilizadas do mundo, e que oferece a maior variedade de prazeres e de satisfações que qualquer outra que se possa comprar com intenções puramente sensoriais.*

Independentemente da forma como se define um vinho, a prova de um vinho é um exercício sensorial. Nela, faz-se uma caminhada com várias etapas em que os sentidos são colocados à prova, em particular, a visão, o olfacto, o paladar e o tacto. A acompanhar-nos nesse percurso está a Química, uma vez que por detrás do que se sente quando se bebe um vinho estão um conjunto de moléculas responsáveis pela cor, pelo aroma, pelo sabor e pelo toque [1,2]. Neste trabalho pretende-se fazer uma visita guiada por algumas destas moléculas. Let's take a walk on the *wine* side?

[1] Juan Moreno, Rafael Peinado (2012) *Enological Chemistry*, Elsevier, Londres, Inglaterra.

[2] António Dias Cardoso (2007) *O Vinho da Uva à Garrafa*, Âncora Editora, Portugal.

CP11. Remoção de compostos fenólicos problemáticos na área vinícola por adsorventes comerciais

Vitor Peniche ⁽¹⁾, P. A. M. Mourão ^(1,2), I. P. P. Cansado ^(1,2)

(1) Departamento de Química da Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora [vitorhtpeniche@gmail.com]

(2) Centro de Química de Évora e Instituto de Investigação e Formação Avançada, Universidade de Évora

Os compostos fenólicos voláteis influenciam muito o aroma natural do vinho. As moléculas mais importantes são o 4-Etilfenol e o 4-Etilguaicol, que são produzidas durante a fermentação das *Dekkera* e *Brettanomyces*. A presença destes compostos, em concentrações elevadas, fornece ao vinho aromas desagradáveis, identificados como suor de cavalo, couro e animal [1].

Este trabalho tem como objetivo a remoção dos compostos acima referidos por adsorção a partir da fase líquida, recorrendo a carvões ativados (CA) essencialmente microporosos. Para aumentar a eficácia da remoção procedeu-se a duas modificações distintas dos CA comerciais da Merck, uma com ácido nítrico e outra com hidróxido de sódio. As quantidades removidas pelos diferentes CA foram quantificadas por UV-Vis, recorrendo a Lei de Lambert-Beer, pois esta lei permite efetuar a correlação entre a absorvância e a concentração da substância em estudo [2].

Os ensaios de adsorção foram precedidos de estudos cinéticos, que permitiram determinar o tempo de equilíbrio destes sistemas (7h). Na fase seguinte procedeu-se à obtenção das isotérmicas de adsorção de ambos os compostos fenólicos, em meio ácido (exemplo na figura 1).

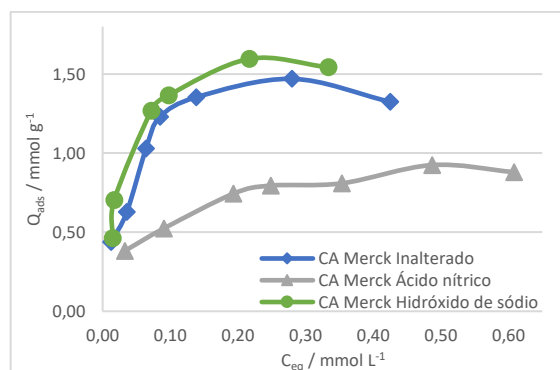


Fig. 1 - Isotérmicas de 4-Etilguaicol em meio ácido.

Com vista a uma aproximação da realidade vinícola foi adicionado etanol absoluto às soluções aquosas, numa proporção de 13% (v/v). Com base nos estudos efetuados podemos verificar que com o CA Merck modificado com NaOH atinge valores de remoção superiores, quando comparado com o CA modificado com HNO₃ e mesmo com o inalterado.

[1] R. Suárez, J. A. Suárez-Lepe, A. Morata, F. Calderón (2007): The production of ethylphenols in wine by yeasts of the genera *Brettanomyces* and *Dekkera*: A review, *Food Chemistry*, 102 (1), 10-21, 2007.

[2] David J. Holme and Hazel Peck, *Analytical Biochemistry*, 3rd ed., Longman, 1998.

CP12. Complexos organometálicos de ruténio com actividade anticancerígena

Paulo J. Mendes ⁽¹⁾, João P. Prates Ramalho ⁽¹⁾, Andreia Valente ⁽²⁾, Pierre Falson ⁽³⁾

(1) Centro de Química de Évora, Instituto de Investigação e Formação Avançada, Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora, Portugal (pjgm@uevora.pt);

(2) Centro de Química Estrutural, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Portugal;

(3) Drug Resistance and Membrane Proteins Team, Molecular Biology and Structural Biochemistry Laboratory, UMR 5086 CNRS-UCBL1, Lyon, France

O cancro é a segunda maior causa de morte nos países desenvolvidos. A cisplatina (CDDP) e os seus análogos tornaram-se os metalofármacos mais utilizados na terapia de diversos tipos de cancro, mas apresentam efeitos secundários causados pela falta de selectividade e desenvolvimento de resistência ao tratamento. A crescente pesquisa na área dos metalofármacos tem tido como objectivo ultrapassar as desvantagens apontadas. Neste contexto, os complexos de ruténio têm demonstrado excelente potencial para esta aplicação [1,2].

Neste trabalho é apresentada a síntese e a caracterização de complexos de fórmula $[\text{Ru}(\eta^5\text{-MeCp})(\text{PPh}_3)(4,4'\text{-R-}2,2'\text{-bpy})]^+$ (**Ru1**, R = H; **Ru2**, R = CH₃; **Ru3**, R = CH₂OH) (Figura 1). Foram efectuados cálculos teóricos por DFT para todos os complexos e os resultados suportam os dados espectroscópicos. Todos os compostos exibem um perfil citotóxico elevado para células cancerígenas do ovário, muito mais pronunciado do que o observado com a cisplatina, tornando-os muito promissores como agentes anticancerígenos.

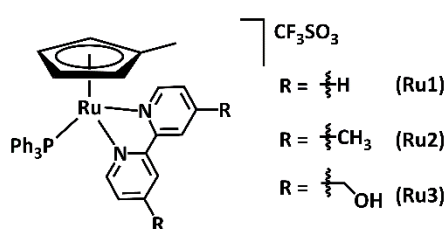


Fig. 1 - Estrutura dos complexos estudados

[1] Morais, T. S.; Valente, A.; Tomaz, A. I.; Marques, F.; Garcia, M. H. (2016) Tracking Antitumor Metallodrugs: Promising Agents with the Ru(II)- and Fe(II)-Cyclopentadienyl Scaffolds. *Future Med. Chem.* 8 (5) 527-544

CP13. Complexos organometálicos de ruténio com potenciais aplicações em NLO: Estudo por DFT

Paulo J. Mendes ⁽¹⁾, João P. Prates Ramalho ⁽¹⁾, M. H. Garcia ⁽²⁾

(1) Centro de Química de Évora, Instituto de Investigação e Formação Avançada, Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora, Portugal (pjgm@uevora.pt);

(2) Centro de Química Estrutural, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Portugal

Os materiais com propriedades de óptica não linear (NLO-*Nonlinear Optics*) são de considerável relevância tecnológica na área dos dispositivos ópticos para armazenamento e modulação óptica de informação. A nível molecular, a magnitude das propriedades ópticas não lineares de 2ª ordem está associada a valores de hiperpolarizabilidade quadrática (β) elevada. A estrutura molecular base para obter valores de β elevados passa pela existência de um sistema altamente polarizável com uma distribuição de carga assimétrica, formando um sistema típico dipolar D-sistema π conjugado-A (D-Doador electrónico; A-Aceitador electrónico). Durante as últimas três décadas os compostos organometálicos e de coordenação têm ocupado um papel relevante uma vez que têm o potencial de combinar as vantagens dos compostos orgânicos com os benefícios que surgem da incorporação de um centro metálico. Neste contexto, os complexos organometálicos de ruténio têm merecido uma atenção especial [1,2].

Neste trabalho foram efectuados cálculos usando a teoria do funcional da densidade (DFT- *Density Functional Theory*) para estudar as propriedades de óptica não linear de segunda ordem de um conjunto de ligandos heterocíclicos e complexos contendo estes ligandos coordenados a um centro organometálico de ruténio. Uma análise dos resultados baseada nas transições electrónicas envolvidas no processo de excitação electrónica forneceu informações valiosas sobre a relação entre a estrutura molecular e a hiperpolarizabilidade quadrática. Verificou-se um aumento significativo de β com a coordenação dos ligandos ao fragmento de organometálico indicando que estes sistemas podem ser promissores na área da NLO.

[1] Benjamin J. Coe (2013) Developing iron and ruthenium complexes for potential nonlinear optical applications. *Coordination Chemistry Reviews* 257 (9-10) 1438-1458.

[2] Tiago J. L Silva, Paulo J Mendes, T. S. Morais, A. Valente, M. P. Robalo, Maria H. Garica (2014) "RuCp" a Versatile Moiety: From NLO to Antitumor Properties. In *Ruthenium: Synthesis, Physicochemical Properties and Applications*, Keller, G. P., Ed. Nova Science Publishers: 2014; pp 105-164.

CP14. Melhoria da produção de pastagens em solos ácidos no Montado: mecanismos bioquímicos do trigo

Jorge M. S. Faria ⁽¹⁾, Ana Paula Pinto ^(1,2), Dora Teixeira ^(2,3), Isabel Brito ^(1,2), Luís Alho ^(1,2), Mário Carvalho ^(1,2)

(1) ICAAM - Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas, Universidade de Évora, Núcleo da Mitra, Ap. 94, 7002-554 Évora, Portugal. [jmsf@uevora.pt]

(2) Escola de Ciências e Tecnologias, Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho nº59, 7000-671 Évora, Portugal.

(3) Laboratório HERCULES, Universidade de Évora, Largo Marquês de Marialva 8, 7000-809 Évora, Portugal.

A produção no sistema do Montado alentejano é fortemente influenciada pela acidez do solo, através do aumento na biodisponibilidade de Al, Fe e Mn e subsequente toxicidade vegetal. Períodos de chuva intensa incrementam a libertação de Fe e Mn na solução do solo aumentando a sua biodisponibilidade. O uso de cal dolomítica, uma prática agrícola comum, pode auxiliar neutralizando a acidez e aumentando o Mg biodisponível no solo, alterando a razão Mg/Mn na planta [1]. No caso do trigo, a colonização precoce a partir de micélio extraradicular (ERM) de fungos micorrízicos arbusculares (AMF) desenvolvido por plantas indígenas do Montado pode ajudar a diminuir os sintomas de toxicidade de Mn e aumentar substancialmente a sua produção [2]. As variações na resposta do trigo às diferentes ERM indicam que a diminuição da concentração interna de Mn não é a única responsável pela diminuição da toxicidade. O presente projeto Alentejo2020 "*Melhoria da produção de pastagens em solos ácidos no montado: abordagem química e biológica*" pretende compreender os mecanismos responsáveis pela variação funcional nos efeitos benéficos dos ERM sobre o crescimento do trigo em solo com toxicidade de Mn. A parte aérea e as raízes de trigo serão analisadas relativamente a) à distribuição elementar subcelular, por ICP-MS, b) ao balanço fitohormonal, por LC-MS e GC-MS, e c) à atividade de enzimas antioxidantes, por espectrofotometria UV/Vis. Os resultados deste estudo podem levar à adoção de práticas agrícolas mais adequadas e mais sustentáveis do ponto de vista ambiental na região do Alentejo.

[1] Goss MJ and Carvalho MJGPR (1992): Manganese toxicity: The significance of magnesium for the sensitivity of wheat plants. *Plant and Soil*, 139:91-98

[2] Brito I, et al. (2014): Managing arbuscular mycorrhizal fungi for bioprotection: Mn toxicity. *Soil Biology and Biochemistry*, 68:78-84.

CP15. Síntese e avaliação da potencial atividade bacteriana de derivados de quitosano

Sérgio Martins ⁽¹⁾, Liliana Casimiro ⁽²⁾, Cátia Salvador ⁽¹⁾, Mara Silva ⁽¹⁾, Ana T. Caldeira ^(1,2), António Pereira ^(1,2)

(1) Laboratório HERCULES, Universidade de Évora, Portugal

*(2) Departamento de Química, Escola de Ciência e Tecnologia, Universidade de Évora, Évora, Portugal
(am|p@uevora.pt)*

O crescimento biológico e atividade microbiana em edifícios, monumentos e obras de arte, promove e acelera a sua degradação, constituindo um motivo de grande preocupação para a sua desejável preservação. Este tipo de problemas impõe a necessidade de estudar esses microrganismos, bem como a forma de agir para evitar a deterioração do Património Cultural. A aplicação de biocidas é uma das formas mais utilizadas e a sua aplicação destina-se a prevenir ou a controlar o crescimento microbiano que pode deteriorar os bens patrimoniais [1]. O quitosano é um biopolímero obtido por desacetilação alcalina da quitina que tem sido alvo de diversos estudos devido à sua elevada bioatividade, biocompatibilidade e biodegradabilidade, aliadas às excelentes propriedades de adsorção e complexação. O quitosano e seus derivados têm sido utilizados no desenvolvimento de muitos produtos e para as mais diversas áreas de aplicação como medicina, ambiente, nutrição, cosmética, agricultura, fotografia, entre outras. A este polímero tem sido ainda atribuídas propriedades antimicrobianas relativamente a fungos e bactérias (Gram-positivas e Gram-negativas) [2,3]. Neste trabalho desenvolveu-se uma metodologia, simples e eficaz, para a síntese de derivados de quitosano. Os produtos finais foram posteriormente avaliados quanto à sua possível atividade biocida utilizando espécies bacterianas isoladas no contexto do património.

Agradecimentos: FCT pelo financiamento da Bolsa de doutoramento SFRH/BD/128807/2017 e ao projecto MEDUSA “Microorganisms Monitoring and Mitigation–Developing and Unlocking novel Sustainable Approaches” ALT20-03-0145-FEDER-00001.

[1] a) Miller, A. et al. (2012), Science of the total environment, 426,1; b) Rojas, J A. et al. (2009) International Biodeterioration & Biodegradation, 63,169; c) Urzì, C.; De Leo, F. International Biodeterioration & Biodegradation 2007, 60, 25.

[2] Aider, M. (2010), LWT-Food Science and Technology, 43,837.

[3] Chung, Y.-C.; Chen, C.-Y. (2008), Bioresource Technology, 99, 2806.

CP16. Desenvolvimento de novos materiais com propriedades biocidas para aplicação como consolidantes em património

M. Plácido ⁽¹⁾, C. Galacho ^(1,2), P. I. Girginova ^(2,3), A. T. Caldeira ^(1,2), A. Candeias ^(1,2)

(1) Departamento de Química da ECT, Universidade de Évora (manuelplacido1994@gmail.com)

(2) Laboratório HERCULES, IIFA, Universidade de Évora.

(3) Laboratório Nacional de Engenharia Civil de Lisboa.

Estudos recentes em conservação e restauro têm visado a definição das etapas e das técnicas de intervenção no património cultural. As tendências atuais de investigação confirmam que a perda de coesão das argamassas históricas, por efeito da dissolução do ligante e/ou de destruição da estrutura porosa, é uma evidência frequente em superfícies arquitetónicas antigas.

A etapa de consolidação surge como uma das principais fases de intervenção nos revestimentos históricos e, enquanto técnica de intervenção, a aplicação de consolidantes tem adquirido bastante interesse para o campo da investigação.

Neste contexto, a aposta em consolidantes inorgânicos tem ganho terreno e assenta no facto de serem altamente compatíveis com os suportes e apresentarem baixo custo, o que representam vantagens quando comparados com os consolidantes de natureza orgânica. Contudo, a fraca eficácia registada no uso da água de cal e no silicato de etilo tem justificado, ao longo dos anos, o aparecimento de outras alternativas como as dispersões em álcool de nanopartículas de cal.

O projeto de desenvolvimento de novos materiais com propriedades biocidas para aplicação como consolidantes em Património Cultural, realizado no Laboratório HERCULES, no âmbito do projeto de estágio da licenciatura em Biotecnologia, teve o propósito de desenvolver métodos de preparação e otimizar as condições de síntese de nanomateriais visando a sua potencial aplicação como consolidantes em substratos de argamassas de cal.

O estudo que aqui se apresenta consistiu na preparação de vários tipos de materiais, nomeadamente, materiais inorgânicos, hidróxido de cálcio (Ca(OH)_2), materiais híbridos preparados pelo método sol-gel a partir de alcóxidos de silício e de titânio (Si(OEt)_4 e Ti(OPr)_4), e materiais híbridos preparados pelo método sol-gel modificado preparados igualmente a partir dos alcóxidos de silício e titânio e usando n-octilamina como surfactante.

Adicionalmente foram realizados ensaios que permitiram avaliar a eficácia dos materiais preparados como biocidas.

Agradecimentos: Este trabalho foi desenvolvido no âmbito do projeto “HIT3CH - HERCULES Interface for Technology Transfer and Teaming in Cultural Heritage”, Ref: ALT20-03-0246-FEDER-000004 co-financiado pela União Europeia através do Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional, ALENTEJO 2020

CP17. Aplicação de consórcios de leveduras imobilizadas em diferentes suportes

João Letras ⁽¹⁾, Cátia Salvador ⁽¹⁾, José Carvalho ⁽²⁾, António Candeias ^(1,2),
A. Teresa Caldeira ^(1,2)

*(1) Laboratório HÉRCULES, Universidade de Évora, Largo Marquês de Marialva 8, 7000-809 Évora, Portugal
(joaolettras_9@hotmail.com)*

*(2) Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologias, Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho 59,
7000-671, Évora, Portugal.*

O setor vitivinícola atualmente é muito competitivo à escala global, uma vez que existem cada vez mais empresas a entrar neste ramo, originando um aumento de vinhos no mercado com excelente qualidade. Como tal, é necessário desenvolver novas metodologias que possam ser aplicadas na área enológica, com o intuito de melhorar a eficiência destes processos de forma qualitativa e quantitativa e contribuir para gerar vinhos com a melhor relação qualidade/preço possível. Este trabalho consistiu no desenvolvimento de sistemas de imobilização de leveduras com potencial enológico e avaliação da sua eficácia em microvinificações. Foram testadas 4 matrizes (alginato de cálcio, argila, tufo vulcânico e argila expandida) e dois métodos de imobilização (adsorção física e adsorção mista) com consórcios de leveduras isoladas das várias fases da fermentação dos mostos de uva. As matrizes foram testadas em culturas com meio de mosto sintético e a cinética do processo foi monitorizada através do consumo de glúcidos e respetiva produção de etanol ao longo do tempo de fermentação. A estabilidade das matrizes, após o período fermentativo, foi analisada por microscopia eletrónica de varrimento. Os resultados mostraram que as leveduras imobilizadas converteram eficientemente os glúcidos do mosto em etanol e os sistemas podem ser reutilizados pelo menos cinco vezes. O sistema de argila expandida com imobilização mista foi o que apresentou maior eficiência. Estes sistemas apresentam um elevado potencial para serem usados em processos enológicos tal como fermentações alcoólicas, paragens de fermentação, desacidificação de vinhos e produção de vinhos de colheita de tardia.

Agradecimentos: Este trabalho foi desenvolvido no âmbito do projeto “HIT3CH - HERCULES Interface for Technology Transfer and Teaming in Cultural Heritage”, Ref: ALT20-03-0246-FEDER-000004 co-financiado pela União Europeia através do Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional, ALENTEJO 2020.

CP18. A concentração atmosférica de proteína como indicador da carga alérgica no ar: Relevância para o desenvolvimento de sistemas de alerta

Rute Arriegas ^(1,2), Ana Galveias ^(1,2), Pedro Alves ⁽¹⁾, Marta Otílio ⁽¹⁾, Ana R. Costa ^(1,2), Célia M. Antunes ^(1,2)

(1) Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora;

(2) Instituto de Ciências da Terra, IIFA, Universidade de Évora, Évora, Portugal (rima@uevora.pt)

O pólen contribui para o comprometimento da qualidade do ar, transportando vários tipos de moléculas entre as quais diversos alérgenos cujos impactos na saúde respiratória de indivíduos sensíveis são consideráveis, estando disponíveis várias estratégias utilizadas para monitorizar os seus níveis no ar. As contagens polínicas são amplamente utilizadas pelos profissionais de saúde como marcadores da carga alérgica; a monitorização direta de alérgenos já foi também utilizada com resultados fiáveis. No entanto, a primeira exige profissionais altamente treinados e a segunda é ainda muito dispendiosa, não estando ainda disponível uma tecnologia económica para inferir a carga alérgica no ar. O objetivo deste trabalho foi avaliar a validade da quantificação da proteína total em amostras de ar ambiental como marcador da carga em bioaerossóis polínicos e, portanto, como preditor de risco de exposição a alérgenos. A matéria particulada (PM) foi colhida usando o captador ChemVol (Butrac Inc., Son, Holanda), com dois estágios, e o pólen foi colhido usando o amostrador Hirst e identificado pela metodologia padrão. A proteína solúvel foi extraída usando tampão fosfato (10mM, pH=7,4), suplementado com 0,01% de Triton X-100, durante 4h, na ausência de luz. As amostras foram centrifugadas a 10000g, 10 min e os sobrenadantes foram recolhidos. A proteína foi quantificada pelo método de Bradford. Foi possível quantificar a proteína total nos extratos entre 2-20 µg/mL. O teor de proteína foi ~3 vezes maior no estágio XL em comparação com o estágio M. O teor diário em proteína variou entre 10-500 µg. Observou-se correlação da proteína com os principais alérgenos de gramíneas e oliveira ($r \sim 0,64$ para XL e $r \sim 0,35$ para M). A proteína na fração XL, mas não na fração M, correlaciona-se com as cargas de pólen de gramíneas e oliveira, bem como com os índices diários de pólen ($r > 0,51$). Este método, de baixo custo, rápido e fácil de realizar, foi eficaz na determinação de proteína presente na atmosfera e correlacionou-se com alérgenos de pólen e pólen. A proteína transportada no ar pode constituir uma ferramenta útil na monitorização da qualidade do ar, contribuindo para a melhoria das estratégias de gestão de risco para diminuir os impactos na saúde das populações expostas.

CP19. Avaliação do conteúdo fenólico e do potencial antioxidante de extratos de *vitis vinifera* L.

M^o Inês Rouxinol ^(1,2), Renata C. Madeira ⁽¹⁾, M^o Rosário Martins ^(1,3), João Mota Barroso ⁽²⁾, Ana Elisa Rato ⁽²⁾

(1) Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho, 59, 7671 Évora; (133165@alunos.uevora.pt)

(2) ICAAM (Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas), IIFA (Instituto de Investigação e Formação Avançada), Universidade de Évora, Pólo da Mitra, Ap. 94, 7002-554 Évora, Portugal.

(3) Laboratório HERCULES -Herança Cultural, Estudos e Salvaguarda, Universidade de Évora, 7000-809 Évora

Durante o processo de maturação, as uvas desenvolvem naturalmente compostos essenciais para a qualidade do vinho, nomeadamente polifenóis, que evidenciam as propriedades organolépticas ⁽¹⁾. Neste estudo foi selecionada uma casta comumente produzidas no Alentejo, a casta Aragonês, de modo a avaliar a evolução do conteúdo fenólico e a evolução da atividade antioxidante durante a maturação. Foi avaliado o conteúdo em compostos fenólicos totais [1]. e os flavonoides totais [2]. A atividade antioxidante dos extratos foi quantificada através do método do DPPH [3], poder redutor total [3] e sistema β -caroteno/ácido linoleico³.

Ao longo da maturação, a casta Aragonês apresentou uma pequena diminuição do conteúdo fenólico. Os extratos das uvas da fase final de maturação apresentaram também elevada atividade antioxidante com maior potencial par a captação de radicais livres. Este tipo de estudos permite aproximar as metodologias de laboratório ao processo de produção de vinho.

[1] Singleton, V. L., Orthofer, R. & Lamuela-Raventós, R. M. (1998) Analysis of total phenols and other oxidation substrates and antioxidants by means of folin-ciocalteu reagent. *Methods Enzymol.* 299, 152–178.

[2] Hosu, A., Cristea, V.-M. & Cimpoi, C. (2014) Analysis of total phenolic, flavonoids, anthocyanins and tannins content in Romanian red wines: Prediction of antioxidant activities and classification of wines using artificial neural networks. *Food Chem.* 150, 113–118.

[3] Arantes S., Piçarra A., Candeias F., Teixeira D., Caldeira A.T., Martins M.R. (2017) Antioxidant activity and cholinesterase inhibition studies of four flavouring herbs from Alentejo, *Natural Product Research*, 31 (18): 2183-2187.

CP20. Conversão de α -pineno na presença de heteropoliácidos imobilizados em SBA-15

J.E. Castanheiro ⁽¹⁾, A. M. Ramos ⁽²⁾, I. M. Fonseca ⁽²⁾, J. Vital ⁽²⁾

(1) CQE, Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora, 7000 Évora, Portugal (jefc@uevora.pt)

(2) LAQV-REQUIMTE, DQ, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa, 2829-516 Caparica, Portugal

A biomassa é uma fonte abundante e sustentável de estruturas de carbono que podem ser consideradas matéria-prima disponível para a produção de compostos químicos e combustíveis. A biomassa da madeira contém muitos compostos como carboidratos, ácidos gordos, terpenos e polifenóis. Tradicionalmente, a transformação desta matéria-prima em compostos com elevado valor acrescentado é realizada na presença de catalisadores homogéneos, os quais colocam sérios problemas ambientais, obrigando à sua separação dos produtos da reação e ao tratamento subsequente do efluente do processo. A substituição dos atuais catalisadores homogéneos por catalisadores heterogéneos permite uma fácil separação da mistura reacional. Os catalisadores heterogéneos são também regeneráveis/reutilizáveis e são “Amigos” para o meio ambiente [1,2,3]. O objetivo deste trabalho é o estudo da reação do α -pineno com etanol na presença de $H_3PW_{12}O_{40}$ imobilizado em SBA-15. Foram preparados catalisadores com diferentes quantidades de heteropoliácido. Observou-se que a atividade catalítica aumenta com a quantidade de heteropoliácido imobilizado em SBA-15. Contudo, quando a quantidade de heteropoliácido imobilizada na matriz de sílica é elevada observa-se um decréscimo da atividade catalítica. A seletividade para o produto principal (α -terpinil etil éter) foi aproximadamente 53%. A estabilidade catalítica do material PW4-SBA-15 foi também estudada. Após a 2ª utilização observou-se que a atividade catalítica tende a estabilizar.

[1] P. Mäki-Arvela, B. Holmbom, T. Salmi, D. Y. Murzin (2007). Recent progress in synthesis of fine and specialty chemicals from wood and other biomass by heterogeneous catalytic processes. *Catal. Rev.* 49, 197–340.

[2] L.M. Sanchez, H.J. Thomas, M.J. Climent, G.P. Romanelli, S. Iborra (2016). Heteropolycompounds as catalysts for biomass product transformations. *Catal. Rev.* 58, 497–586.

[3] J.E. Castanheiro, I.M. Fonseca, A.M. Ramos, J. Vital (2007). Tungstophosphoric acid immobilised in SBA-15 as an efficient heterogeneous acid catalyst for the conversion of terpenes and free fatty acids. *Micropor. Mesopor. Mater.*, 249, 16-24.

CP21. A utilização de isótopos estáveis na avaliação de paleodietas: a fauna e os humanos do complexo arqueológico dos perdigões (Reguengos de Monsaraz, Portugal)

C. Barrocas Dias^(1,2), I. Žalaitė⁽²⁾, A.-F. Maurer⁽²⁾, A. C. Valera⁽³⁾

[1] Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora, Portugal (cmbd@uevora.pt)

[2] Laboratório HERCULES, Universidade de Évora, Portugal

[3] NIA-ERA Arqueologia, Lisboa, Portugal

Constituído por fossos concêntricos escavados na rocha que culminam num centro geométrico, ocupando uma área total de 16 ha, o Complexo Arqueológico dos Perdigões revelou uma necrópole e um recinto cerimonial megalítico, com diferentes fases ocupacionais que datam do Neolítico Médio até ao Calcolítico/início da Idade do Bronze (3500 a 2000 a.C.). Este sítio arqueológico é considerado um ponto de agregação, fazendo parte de um conjunto mais alargado de povoamentos.

Neste estudo foi avaliada a dieta das populações através da determinação das razões isotópicas de carbono e azoto no colagénio em restos osteológicos humanos e faunísticos (*Canis familiaris*, *Bos taurus*, *Bos primigenius*, *Sus sp.*, *Ovis/Capra*, *Cervus elaphus*, *O. cuniculus*, *Equus sp.*) de diferentes períodos de ocupação do sítio. O estudo da fauna é necessário para fazer o enquadramento ambiental dos resultados que são obtidos nos restos osteológicos humanos [1]. A preservação das amostras humanas não é muito boa (os ossos estão muito fragmentados e com sinais de erosão), e das 30 amostras analisadas do Sepulcro 1, apenas 3 tinham um grau de preservação adequado. Nesta poster são apresentados, para comparação, alguns resultados já publicados por Emslie *et al.* [2].

Os resultados revelaram que os animais tinham uma dieta à base de plantas em C3, com pequenas diferenças entre os animais domésticos no que respeita à espécie e ao período histórico. Os humanos apresentam igualmente uma dieta baseada em plantas C3 com a introdução de alguma proteína animal, o que está de acordo com os resultados observados em sítios arqueológicos com cronologia similar da Península Ibérica.

[1] Schoeninger, M. J. (2011). Diet reconstruction and ecology using stable isotope ratios. In: A Companion to Biological Anthropology (ed. C. S. Larsen), Wiley-Blackwell, Oxford, UK.

[2] Emslie, S. D., Brasso, R., Patterson, W. P., Valera, A. C., McKenzie, A., Silva, A. M., Gleason, J. D., Blum, J. D. (2015). Chronic mercury exposure in Late Neolithic/Chalcolithic populations in Portugal from the cultural use of cinnabar. Scientific Reports, 5.

CP22. Novas abordagens para deteção de contaminantes microbianos da cortiça

M. Silva ⁽¹⁾, D. Domingues ^(1,2), C. Gil ^(1,2), T. Rosado ⁽¹⁾, S. Martins ^(1,2), A. Pereira ^(1,2), A. Candeias ^(1,2), A. T. Caldeira ^(1,2)

(1) Laboratório HERCULES, Universidade de Évora, Évora, Portugal (marasilva50@hotmail.com)

(2) Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora, Évora, Portugal

Portugal é um dos maiores produtores de cortiça, destacando-se pela fabricação industrial de rolhas que detém um impacto significativo na economia portuguesa [1]. A ocorrência do denominado “sabor a rolha” em vinho engarrafado, promotor de alterações desagradáveis no seu aroma e sabor, é responsável por perdas económicas significativas na indústria de transformação desta matéria-prima [2]. Esta alteração organoléptica é consequência da presença de tricloroanisóis que pode estar associada à presença de contaminação microbiológica [3]. O objetivo deste trabalho foi inferir sobre as comunidades microbianas envolvidas em diversas patologias de cortiça e a sua influência na microestrutura e composição química deste material.

Fungos filamentosos como *Talaromyces variabilis*, *Trichoderma harzianum* e varias estirpes de *Penicillium*, foram os mais predominantes nestas pranchas. A análise das mesmas por SEM-EDS e difração de raios-X, demonstrou uma diferença química e física significativa entre as amostras saudáveis e cortiças com sinais de patologia evidente. De facto, as últimas apresentaram uma matriz e poros alterados e degradados devido à presença significativa de contaminantes microbianos. O esquema metodológico adotado constitui um método promitente para aplicação na indústria de transformação de cortiça, a fim de analisar e prevenir possíveis defeitos que possam promover aromas e sabores desagradáveis nos vinhos.

Os autores agradecem o apoio financeiro pelo projeto "MEDUSA-Microorganisms Monitoring and Mitigation—Developing and Unlocking novel Sustainable Approaches" ref. ALT20-03-0145-FEDER-000015, Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional ALENTEJO 2020 (Programa Operacional Regional do Alentejo).

[1] Danesh P, Velez Caldas F, Figueiredo Marques J, San Romão M (1997) Mycobiota in Portuguese ‘normal’ and ‘green’ cork throughout the manufacturing process of stoppers. J Appl Microbiol, 82 (6), 689-694.

[2] Oliveira A, Peres C, Correia Pires J, Silva Pereira C, Vitorino S, Figueiredo Marques J, Barreto Crespo M, San Romao M (2003) Cork stoppers industry: defining appropriate mould colonization. Microbiol Res, 158 (2), 117-24.

[3] Pereira C, Marques J, San Romão M (200) Cork Taint in Wine: Scientific Knowledge and Public Perception — A Critical Review. Crit Rev Microbiol, 26 (3), 147-162.

CP23. Caracterização inorgânica de cogumelos *Amanita ponderosa*: Abordagem em *Data Mining*

Cátia Salvador^[1], M. Rosário Martins^[2], Henrique Vicente^[2,3], A. Teresa Caldeira^[1,2]

[1] Laboratório HERCULES, Universidade de Évora, Largo Marquês de Marialva 8, 7000-809 Évora, Portugal
(cscs@uevora.pt)

[2] Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho 59, 7000-671 Évora, Portugal

[3] Centro ALGORITMI, Universidade do Minho, Braga, Portugal

A espécie silvestre de cogumelos *Amanita ponderosa* é característica de microclimas da Península Ibérica. Gastronomicamente é muito relevante, devido não só ao consumo tradicional das populações rurais, mas também devido ao seu valor comercial nos mercados *gourmet*. Desta forma a caracterização mineral de cogumelos comestíveis torna-se extremamente importante para os processos de certificação e comercialização [1,2].

O objetivo deste estudo focou a análise da composição inorgânica de corpos de frutificação de *A. ponderosa* (Ca, K, Mg, Na, P, Ag, Al, Ba, Cd, Cr, Cu, Fe, Mn, Pb e Zn) e seus respetivos substratos de solo de 24 pontos de amostragem diferentes do sudoeste da Península Ibérica (nomeadamente Alentejo, Andaluzia e Extremadura). A análise da composição mineral revelou alto conteúdo em macroatomtos, tais como: potássio, fósforo e magnésio, presença de oligoelementos importantes e baixos teores de metais pesados nos limites da Dose Diária Recomendada (DDR) [2]. O fenómeno de bioconcentração foi observado para alguns macro e microelementos, tais como K, Cu, Zn, Mg, P, Ag e Cd. Por outro lado, observou-se que os corpos de frutificação de *Amanita ponderosa* apresentam diferentes perfis inorgânicos de acordo com a sua localização [1]. Metodologias de *Data Mining* foram aplicadas de forma a estudar a composição mineral dos corpos de frutificação de *A. ponderosa*, tendo sido utilizado o método de agrupamento “k-means” recorrendo a Árvores de Decisão (DTs) de forma a explicar o modelo de segmentação [1]. Os resultados apontaram que é possível gerar um modelo explicativo de segmentação, realizado com dados baseados na composição inorgânica de cogumelos e conteúdo mineral do solo, mostrando a possibilidade de relacionar esses dois tipos de dados.

Agradecimentos: Este trabalho foi desenvolvido no âmbito do projeto “HIT3CH - HERCULES Interface for Technology Transfer and Teaming in Cultural Heritage”, Ref: ALT20-03-0246-FEDER-000004 co-financiado pela União Europeia através do Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional, ALENTEJO 2020

[1]. Salvador C, Martins MR, Vicente H, Caldeira AT (2018). International Journal of Analytical Chemistry, pp.1-18, Article ID 5265291, DOI:10.1155/2018/5265291.

[2]. Salvador C, Martins MR, Vicente H, Neves J, Arreiro JM, Caldeira AT (2013). Agroforestry Systems, 87:295–302, DOI: 10.1007/s10457-012-9548-y.

CP24. Âmbar pré-histórico em Portugal: Um estudo de proveniência

Ana Manhita ⁽¹⁾, Carlo Bottaini ⁽¹⁾, Sérgio Martins ⁽²⁾, Leonor Rocha ⁽³⁾, Cristina Barrocas Dias ⁽²⁾

(1) Laboratório HERCULES, Universidade de Évora, Évora, Portugal (anaccm@uevora.pt)

(2) Departamento de Química, Escola de Ciência e Tecnologia, Laboratório HERCULES, Universidade de Évora, Évora, Portugal

(3) Departamento de História, Escola de Ciências Sociais, Centro de História de Arte e Investigação Artística, Universidade de Évora, Évora, Portugal

O âmbar é uma resina de árvore fossilizada, muito apreciada pela sua cor e beleza naturais. O processo de fossilização de resinas vegetais, principalmente coníferas e algumas angiospermas, ocorre ao longo de milénios e envolve a perda de componentes voláteis e polimerização dos diterpenóides e triterpenóides constituintes da resina, formando posteriormente as massas de âmbar. Geralmente, os artefactos de âmbar são considerados indicadores de prestígio, e estão relacionados com o comércio de longa distância.

Os artefactos de âmbar estão documentados desde o período Neolítico, embora sejam raros em contextos pré-históricos portugueses [1,2]. O objectivo deste trabalho é realizar um estudo sistemático de contas e pendentas de âmbar depositados em museus portugueses, de modo a determinar a possível proveniência da matéria-prima. As contas e pendentas analisados neste estudo podem ser atribuídos a um período entre 5000 e 250 a.C. e, relativamente ao enquadramento arqueológico, são de contextos megalíticos (Anta Grande da Comenda da Igreja, Anta do Zambujeiro), necrópoles (Alcalar 3 e 4) e povoados (Castro de Pragança). Para a caracterização destes artefactos recorreu-se às técnicas de pirólise acoplada a cromatografia gasosa com espectrometria de massa (Py-GC/MS) e espectroscopia de infravermelho com transformada de Fourier (FTIR), que fornecem um método rápido e eficaz para a identificação de resinas fósseis, exigindo quantidades mínimas de amostra e fácil preparação de amostra.

Agradecimentos: Os autores agradecem o apoio financeiro da Fundação para a Ciência e Tecnologia através do projecto UID/Multi/04449/2013 (POCI-01-0145-FEDER-007649).

[1] Vilaça, R., Beck, C.W., Stout, E.C. (2002) Madrider Mitteilungen, 43, 61-79.

[2] Murillo-Barroso, M., Martín-Torres, M. (2012) European Journal of Archaeology, 15 (2), 187-216.

CP25. Síntese de fosfonatos e avaliação da sua atividade anti-inflamatória e antioxidante

Daniela Lopes ⁽¹⁾, Helena Parente ⁽¹⁾, M. Rosário Martins ^(1,3), Fátima C. Teixeira ⁽⁴⁾, António P. S. Teixeira ^(1,2)

(1) Departamento de Química – Escola de Ciências e Tecnologia – Universidade de Évora (l33105@alunos.uevora.pt)

(2) CQE – Centro de Química de Évora – IIFA – Universidade de Évora

(3) Laboratório HERCULES – Herança Cultural, Estudos e Salvaguarda – IIFA – Universidade de Évora

(4) Laboratório Nacional de Energia e Geologia. I.P., Lisboa

Os fosfonatos são uma classe importante de compostos químicos, utilizados na terapia de patologias ósseas, tais como a doença de Paget, hipercalcémia e osteólise associada a tumores, devido à sua capacidade para inibir a perda óssea. Estes compostos têm também demonstrado atividade anticancerígena in vitro com inibição da proliferação celular de várias linhas tumorais [1,2].

Neste trabalho procedeu-se à síntese de ácidos fosfónicos e ésteres monofosfónicos, sintetizados a partir de aldeídos, bem como à avaliação da atividade antioxidante e da atividade anti-inflamatória dos compostos obtidos. A atividade antioxidante foi avaliada por três métodos diferentes, nomeadamente o método do radical DPPH, o sistema β -caroteno/ácido linoleico e o poder redutor total, com vista a inferir sobre o mecanismo de ação. Os estudos de atividade anti-inflamatória in vitro foram também avaliados por diferentes mecanismos de ação, com determinação da capacidade de inibição da desnaturação da albumina e de inibição da atividade de lipoxigenases. A toxicidade dos fosfonatos em estudo foi avaliada utilizando o teste de letalidade em *Artemia salina*.

Os compostos em estudo apresentaram atividade antioxidante, tendo-se observado que o composto (E)-3-(2-nitrofenil)-1-hidroxi-propen-2-ilfosfonato de dimetilo foi o que apresentou melhor resultados na capacidade para sequestrar radicais, de poder redutor total, bem como na capacidade de proteção do substrato lipídico. Alguns dos compostos apresentaram também elevada capacidade anti-inflamatória, designadamente os ésteres 1-(4-bromofenil)-1-hidroximetilfosfonato de dimetilo e 1-(4-formilfenil)-1-hidroximetilfosfonato de metilo, os quais apresentaram elevado potencial para inibir a atividade da lipoxigenase.

[1] Russell, R. G. G. (2011). Bisphosphonates: The first 40 years. *Bone*, 49(1), 2–19. <https://doi.org/10.1016/j.bone.2011.04.022>

[2] Papapoulos, S. E. (2008). Bisphosphonates: how do they work? *Best Practice and Research: Clinical Endocrinology and Metabolism*, 22(5), 831–847. <https://doi.org/10.1016/j.beem.2008.07.001>

CP26. Avaliação da influência dos enzimas microbianos na produção de arroz com baixo teor de arsénio

Andreia Piçarra ^(1,2), Andreia A. Paleco ⁽¹⁾, M. Rosário Martins ^(1,2), Jorge Delgado Nunes ⁽³⁾, Carlos Alexandre ⁽³⁾

(1) Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora, R. Romão Ramalho, 59, 7000-671, Évora, Portugal (l33313@alunos.uevora.pt)

(2) Laboratório HERCULES, Universidade de Évora, Largo Marques de Marialva 8, 7000-809, Évora, Portugal

(3) Departamento de Geociências e ICAAM - Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas, Universidade de Évora, Apdo. 94, 7002-554 Évora, Portugal

A qualidade do solo mantém a coerência entre os componentes químicos, físicos e biológicos. Um dos indicadores mais importantes desta são os microrganismos, que estão na base da rede alimentar. O arsénio é um metaloide muito tóxico para as várias formas de vida, podendo encontrar-se como contaminante não só da água potável, mas também de outros alimentos, como o arroz (*Oryza sativa*). A espécie mais tóxica encontrada no arroz é As^{3+} , que apresenta valores elevados de solubilidade em água e de mobilidade no solo, sendo eficazmente absorvido pelas raízes e, ao chegar aos grãos, facilmente introduzido na alimentação.

Neste estudo, pretendeu-se avaliar a atividade enzimática de desidrogenases, fosfatases, β -glucosidases, arilsulfatases e ureases no solo e na solução do solo em ensaios laboratoriais efetuados com solo submerso contendo diferentes teores de arsénio, com e sem adição de óxidos de ferro e/ou manganês, sintetizados e naturais, com vista a avaliar a redução dos níveis de arsénio e a correlacioná-los com a presença de atividade microbiana. Os resultados mostraram um aumento da atividade enzimática do solo nos ensaios contendo óxidos de ferro e/ou manganês. Nas soluções do solo, ao longo dos 60 dias, a atividade enzimática diminuiu no solo simples, no controlo e nos solos modificados. Os valores de atividade de desidrogenases indicaram a presença de populações microbianas ativas, mas não se observaram diferenças significativas para os diferentes ensaios.

Agradecimentos: Este trabalho é co-financiado pela União Europeia através do Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional, enquadrado no ALENTEJO 2020 (Programa Operacional Regional do Alentejo) através do projeto "Produção de Arroz com baixo teor de arsénio" com a referência ALT20-03-0145-FEDER-000024.

CP27. Aplicação da técnica Hibridação *In Situ* Fluorescente (FISH) em microrganismos que deterioram o Património Cultural

Ricardo Vieira ⁽¹⁾, Patrícia Branco ⁽¹⁾, Sílvia Macedo Arantes ^(1,2), António Candeias ^(1,2), Marina González-Pérez ⁽¹⁾, Ana Teresa Caldeira ^(1,2)

(1) Laboratório HERCULES, Universidade de Évora, Largo Marquês de Marialva 8, 7000-809, Évora, Portugal; [ricardo.o.vieira89@gmail.com]

(2) Departamento de Química, Escola de Ciências e tecnologia, Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho 59, 7000-671, Évora, Portugal

Os microrganismos biodeteriogénicos provocam sérios danos estéticos e estruturais no Património Cultural [1]. Assim, na sua salvaguarda, a seleção de um método de amostragem adequado e de uma técnica eficaz de deteção/identificação destes microrganismos é extremamente importante. A técnica RNA-FISH é uma técnica molecular que permite a identificação de espécies integradas em comunidades microbianas [2,3]. O objetivo deste trabalho foi determinar a eficácia de recuperação de microrganismos por diferentes métodos de amostragem em dois tipos de suporte (pedra e madeira) e a validação do protocolo RNA-FISH, previamente desenvolvido pelo nosso grupo de investigação [4] na deteção/identificação de bactérias, leveduras e fungos-filamentosos biodeteriogénicos, utilizando sondas RNA-FISH marcadas com os fluoróforos ATTO 647N e CY3 associados a sondas: i) universais para bactérias - EUB338 e eucariotas - EUK516; e ii) específicas para *Rhodotorula* sp. e *Cladosporium* sp. desenhadas no nosso grupo de investigação. Os resultados mostraram que é possível recuperar e identificar os microrganismos das diferentes matrizes bem como obter bons sinais de fluorescência utilizando tanto as sondas universais como as específicas.

Agradecimentos: Este trabalho foi co-financiado pela FCT através dos projetos MICROTECH-ART e as bolsas SFRH/BD/118028/2016 e SFRH/BPD/100754/2014 e pela União Europeia através dos fundos de Desenvolvimento Regional Europeio ALENTEJO 2020, projeto MEDUSA- ALT20-03-0145-FEDER-000015.

[1] Allsopp D., Seal K. J., Gaylarde C. C. (2004). Introduction to biodeterioration, Cambridge University Press.

[2] Amann R, Ludwig W, Schleifer K (1995). Phylogenetic identification and in situ detection of individual microbial cells without cultivation. Microbiol. Rev. 59,143–169.

[3] Moter, A., Gobel, U.B (2000). Fluorescence In Situ hybridization (FISH) for direct visualization of microorganisms J Microbiol. Methods 41, 85–112.

[4] González-Pérez, M., Vieira, R.; Branco, P., Candeias, A., Caldeira, A. T. (2017) Dual phylogenetic staining protocol for simultaneous analysis of yeast and bacteria in artworks. J. Appl. Phys. A 123, 142.

CP28. Mecanismos de ação antimicrobiana e antioxidante de óleos essenciais de *Lavandula* spp. e *Thymus* spp. do Alentejo

Marisa Guerreiro ^(1,2), Andreia Piçarra ^(1,2), Sílvia Arantes ^(1,2), Fani Bexiga ⁽¹⁾, Laura Prezado ⁽¹⁾, M. Fátima Candeias ⁽¹⁾, A. Neto Vaz ⁽¹⁾, C. Pinto Gomes ⁽³⁾, A. Teresa Caldeira ^(1,2), M. Rosário Martins ^(1,2)

(1) Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora, R. Romão Ramalho, 59, 7000-671, Évora, Portugal (l33350@alunos.uevora.pt)

(2) Laboratório HERCULES, Universidade de Évora, Largo Marques de Marialva 8, 7000-809, Évora, Portugal

(3) ICAAM - Instituto Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas & Departamento de Paisagem, Ambiente e Ordenamento, R. Romão Ramalho 59 7000-671, Évora, Portugal

Os óleos essenciais (OEs) de plantas da família Lamiaceae, muitas utilizadas como condimentares na Dieta Mediterrânica, são referidos frequentemente pelas suas propriedades antioxidantes e antimicrobianas. Neste trabalho, procedeu-se à avaliação das propriedades antioxidantes, por diferentes mecanismos de ação e do potencial antimicrobiano dos OEs de *Lavandula luisieri*, *Lavandula viridis*, *Thymus capitellatus* e *Thymus mastichina*, autóctones da região Alentejo. A atividade antioxidante foi avaliada recorrendo a três métodos diferentes, radical DPPH, β -caroteno/ácido linoleico e poder redutor. A avaliação da atividade antimicrobiana foi avaliada face a bactérias Gram-positivas e Gram-negativas e a fungos filamentosos através do método de difusão em meio sólido e com determinação da concentração mínima inibitória (CMI).

Os OEs apresentaram elevada atividade antioxidante, com potencial para atuar como sequestradores de radicais livres ($9,8 < IC_{50} < 21,5$ mg/mL), como agentes redutores, bem como inibidores da peroxidação lipídica. Estes OEs exibiram também potencial antibacteriano, tendo-se revelado ainda mais ativos face às bactérias Gram-positivas. No que respeita à população fúngica, os isolados dos géneros *Penicillium* e *Aspergillus* foram os que apresentaram maior sensibilidade aos OEs. O elevado potencial antioxidante e antimicrobiano demonstrado poderá sugerir a utilização destas plantas e dos seus OEs nas indústrias alimentar e fitoterapêutica.

Agradecimentos: Este trabalho é co-financiado pela União Europeia, Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional, enquadrado no ALENTEJO 2020 (Programa Operacional Regional do Alentejo) através do projeto "HIT3CH - HERCULES Interface for Technology Transfer and Teaming in Cultural Heritage" com a referência ALT20-03-0246-FEDER-000004.

CP29. Modelos da membrana do HIV: Uma abordagem *coarse-grained*

Catarina Pronto ⁽¹⁾, António M. T. Martins do Canto ^(1,2)

(1) Universidade de Évora (m39591@alunos.uevora.pt)

(2) REQUIMTE Polo de Évora

O vírus da imunodeficiência humana tipo 1 (HIV-1) é um retrovírus que obtém o seu envelope lipídico por brotação através da membrana plasmática de infecção células hospedeiras. Vários estudos indicaram que a membrana do HIV-1 difere da membrana plasmática celular do produtor, sugerindo que o vírus cresce desde os subdomínios preexistentes ou pela indução mediada de uma membrana em brotação especializada. Com base nas análises quantitativas realizadas por Brugger e Loritate à constituição da membrana do HIV, foram desenhados nove modelos de membranas rígidos e similares à membrana do HIV. A partir do *CHARM-GUI Martini maker*, foram criados os sistemas membranares, com diferentes teores dos lípidos POPC, POPE, CHOL, DPPS, DPPI, DPSM, POPG e DPCE nas bicamadas.

De maneira a perceber a importância dos lípidos presentes na membrana viral do HIV, a forma como interagem e se comportam nos processos biológicos membranares. Por dinâmica molecular analisou-se as propriedades membranares destes nove sistemas. Dentro as quais se encontra a área por lípido e a área por colesterol de cada membrana, através do método de monte carlo, a fim de avaliar o progresso dos sistemas, a variação temporal das áreas superficiais dos lípidos membranares. A espessura de membrana, para avaliar a estabilidade do sistema, a difusão lateral, calculada a partir do quadrado da média do deslocamento de duas dimensões (*mean square displacement* – MSD) usando a relação de Einstein e os parâmetros de ordem onde incluímos uma pesquisa de microdomínios, calculados para cada pseudo átomo.

Com base nestas propriedades membranares foi possível aferir que a inserção de lípidos diferentes a bicamada lipídica altera não só o seu comportamento como sofrem modificações na sua estrutura e difusão. Assim, o colesterol pode não conferir sempre mais rigidez às membranas com a presença de diferentes lípidos e os resultados sugerem uma afinidade maior com os lípidos POPC e DPSM. Os sistemas simulados com menor área superficial, apresentavam uma espessura de membrana maior, com coeficientes de difusão mais baixos logo, parâmetros de ordem, em média, mais altos o que não impediu a formação de microdomínios com propriedades locais diferentes.

CP30. *Villa romana de Horta da Torre: estudo das argamassas*

A. Ditta ⁽¹⁾, P. Moita ⁽²⁾, C. Galacho ⁽³⁾, A. Carneiro ⁽⁴⁾, J. Mirão ⁽²⁾, A. Candeias ⁽³⁾

(1) Laboratório HERCULES, Universidade de Évora

(2) Laboratório HERCULES, Departamento de Geociências, Universidade de Évora (pmoita@uevora.pt)

(3) Laboratório HERCULES, Departamento de Química, Universidade de Évora

(4) CHAIA-UE, CECH-FLUC, Departamento de História, Universidade de Évora

A *Villa romana da Horta da Torre* (sec. IV) apresenta soluções arquitectónicas e decorativas que a tornam num local único. Destaca-se a grande sala com dupla abside, coroada por um *stibadium*, onde o proprietário recebia os seus convidados em ambiente de grande fausto, que estaria associado a um reservatório de água que permitiria inundar o piso do *triclinium* [1].



Fig 1. Vista aérea da Villa Romana Horta da Torre (Cabeço de Vide, Conselho de Fronteira)

Neste trabalho apresentam-se os resultados do estudo material de diferentes tipos de argamassas no sentido de melhor compreender as várias estruturas deste complexo habitacional. A metodologia de caracterização compreendeu diferentes fases e técnicas de análise, nomeadamente, microscopia ótica, difração de raios X, análise termogravimétrica e a microscopia eletrónica de varrimento com espectroscopia de raios X por dispersão de energias. Os resultados demonstram que as argamassas provenientes das paredes externa e internas do reservatório adjacente ao *stibadium* possuem as mesmas características, em termos de composição do ligante, traço e agregados, apontando para uma edificação num só momento. Nas amostras com camada cromática mostraram que o pigmento vermelho foi aplicado diretamente sobre argamassa sem uma camada preparatória. Por outro lado, as tesselas, nomeadamente de vidro colorido e calcário oolítico, encontraram-se incorporados em camadas espessas de cal. As argamassas associadas a um pequeno tanque de água apresentam muitos fragmentos de cerâmica, sendo que as restantes argamassas de enchimento não apresentam este aditivo. Refira-se, ainda, que a variabilidade de matérias-primas utilizada é compatível com a geologia da região.

[1] Carneiro, A. (2014) *Otium, materialidade e paisagem nas villae do Alto Alentejo português em época romana. Espacio, tiempo y forma. Série II - Historia Antigua* nº 27, Madrid, p. 207-231

CP31. Alteração cromática de calcários ornamentais

Luís Dias ^(1,2), Tânia Rosado ⁽¹⁾, Pedro Barrulas ⁽¹⁾, Luís Lopes ^(3,4), José Mirão ^(1,3), António Candeias ^(1,2), Ana Teresa Caldeira ^(1,2)

(1) Laboratório HERCULES - Universidade de Évora; (luisdias1234@gmail.com)

(2) Departamento de Química da ECT - Universidade de Évora;

(3) Departamento de Geociências da ECT - Universidade de Évora;

(4) Instituto de Ciências da Terra - Universidade de Évora

A indústria de pedra ornamental, historicamente centrada na economia europeia e asiática, aumentou substancialmente nos últimos anos sobretudo em calcários e mármore. Estes materiais podem apresentar uma enorme diversidade cromática, sendo este um dos principais parâmetros que determina a escolha dos profissionais num projecto arquitetónico, bem como o valor de uma pedra ornamental no mercado [1], sendo crucial perceber como a sua cor é naturalmente conferida e como este parâmetro pode alterar ao longo do tempo. O Calcário Azul é um dos tipos de rochas exploradas e processadas em Portugal com especial impacto no mercado nacional, cuja alteração química tem sido uma problemática pertinente [2], levando a reparações onerosas por parte das companhias que o comercializam. De forma a compreender este fenómeno foram utilizadas várias técnicas analíticas e metodologias complementares, focadas na identificação da composição química e mineralógica, bem como a presença de biocontaminação. Este calcário caracteriza-se pela presença de duas cores diferentes, de composição elementar e mineralógica similar, da qual uma delas se destaca pela presença de uma maior quantidade de pirite. Este mineral parece estar relacionado com a modificação de cor, resultando na formação de sulfatos de cálcio e óxidos de ferro na superfície da pedra. Por outro lado, nestas áreas predominam células bacterianas metabolicamente ativas, maioritariamente da espécie *Geodermatophilus modestobacter*, já reportadas em fenómenos de alteração de pedra aplicada em património [3]. A presença de biocontaminação associada aos produtos de alteração detetados na rocha sugere que este é um fenómeno de alteração inorgânica mediada por atividade microbiológica, que provavelmente aumentará o efeito degradativo.

Este trabalho foi co-financiado pelos projetos CALCITEC (POCI-01-0247-FEDER-003457), COLOURSTONE (ALT20-03-0145-FEDER-000017) e MEDUSA (ALT20-03-0145-FEDER-000015), co-financiados pela União Europeia através do Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional, enquadrado no ALENTEJO 2020 e pela FCT através da bolsa SFRH/BD/111498/2015 co-financiada pelo Fundo Social Europeu e fundos nacionais MEC.

[1] Siegesmund, S., Török, A. (2011). *Durability*, S. Siegesmund and R. Snethlage, SPRINGER-VERLAG.

[2] Kourkkoulis, S. (2006). SPRINGER. ISBN-10 1-4020-5077-1.

[3] Urzi, C., Brusetti, L., Salamone, P., Sorlini, C., Stackebrandt, E. and Daffonchio, D. (2001). *Environmental Microbiology*, 3, 471-479.

CP32. Identificação de ligantes proteicos em pinturas de cavalete por marcação fluorescente

Ooi Su Yin ⁽¹⁾, Cátia Salvador ⁽¹⁾, António Candeias ^(1,2), António Pereira ^(1,2), João Paulo Prates Ramalho ^(2,3), Ana Teresa Caldeira ^(1,2)

(1) Laboratório HERCULES, Universidade de Évora, Largo Marquês de Marialva 8, 7000-809 Évora, Portugal (atc@uevora.pt)

(2) Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho 59, 7000-671 Évora, Portugal

(3) Centro de Química de Évora, Universidade de Évora, Portugal

Este trabalho teve como objetivo desenvolver uma metodologia de marcação fluorescente de ligantes proteicos usados habitualmente em pintura de cavalete. Desenvolveu-se um método simples, rápido, económico e com elevada sensibilidade. O cromóforo usado na marcação das proteínas foi o éster de cumarina de 4-sulfotetrafluorofenil (C392). Na primeira etapa do desenvolvimento da metodologia, as rotulagens entre a proteína e a C392 foram realizadas com proteínas comerciais BSA (A2153), ovalbumina (A5378), caseína (C3400) e colagénio (C9879) (Sigma-Aldrich). O cromóforo foi ligado com diferentes concentrações das proteínas comerciais para determinar a quantidade mínima e obter um perfil de eletroforese detetável. Posteriormente, a metodologia de rotulagem fluorescente otimizada foi aplicada a proteínas extraídas de gema e clara de ovo, leite bovino e pele de animais. As bandas fluorescentes resultantes da marcação entre C392 e as proteínas extraídas mostraram bandas fluorescentes características, consistentes com os padrões comerciais. Além disso, o método foi testado em provetes de pintura para confirmar a sua adequação na aplicação às complexas matrizes das pinturas de cavalete. Os provetes de pintura foram construídos pela mistura de proteínas, extraídas de gema e clara de ovo de galinha, leite bovino, pele de coelho e pele de carneiro com os pigmentos branco de chumbo, ocre amarelo e negro animal. Para extração das proteínas dos modelos de pintura usou-se um protocolo previamente otimizado [1] sendo essas amostras utilizadas na marcação fluorescente. Os resultados mostraram que a rotulagem fluorescente dos ligantes proteicos de pinturas pode constituir uma eficaz e económica ferramenta analítica para identificação de proteínas no contexto de conservação e restauro. Em suma, a identificação de diferentes ligantes proteicos é possível usando esse método de rotulagem fluorescente otimizado.

Agradecimentos: Este trabalho foi desenvolvido no âmbito do projeto “HIT3CH - HERCULES Interface for Technology Transfer and Teaming in Cultural Heritage”, Ref: ALT20-03-0246-FEDER-000004 co-financiado pela União Europeia através do Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional, ALENTEJO 2020

[1] C. Salvador, A. Branco, A. Candeias, A.T. Caldeira, Innovative approaches for immunodetection of proteic binders in art, E-Conservation Journal, 5, 2017. doi: 10.18236/econs5.201708

CP33. Remoção de sulfometoxazol por argilas em LCM

Vlademir Silva

Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora (silvovlademir@gmail.com)

A qualidade da água é uma das grandes preocupações ambientais actuais. Em particular, a ocorrência e destino de fármacos no ambiente aquático tem-se tornado um problema emergente [1-3]. Os antibióticos têm recebido uma especial atenção dado o elevado risco de desenvolvimento de bactérias resistentes como resultado de uma prolongada exposição destas a antibióticos presentes nas águas [1].

Os leitos construídos de macrófitas (LCMs) têm surgido ultimamente como sistemas de tratamento complementares ou alternativos aos processos convencionais de tratamento de águas residuais (que são em geral ineficientes na remoção deste tipo de poluentes), tendo já apresentado bons resultados na remoção de vários fármacos [1-3]. Estes sistemas imitam os processos de depuração que ocorrem nas zonas húmidas naturais, utilizando a mesma vegetação, solos e microrganismos, de uma forma otimizada com o propósito de aplicação para tratamento de águas residuais.

Pretendeu-se com o presente trabalho avaliar a remoção do antibiótico sulfametoxazol (uma sulfanilamida detectada frequentemente em águas residuais e que já foi correlacionada com o desenvolvimento de bactérias resistentes e mutações genéticas em organismos) em dois materiais de suporte para utilização em LCM, vermiculite e LECA. Verificou-se que ambos os materiais removem o fármaco, sendo a vermiculite o material mais eficiente e mais rápido a remover o poluente.

Esta é uma primeira etapa para o objectivo final de avaliar e otimizar o papel dos vários componentes do LCM de modo a maximizar a remoção do poluente pelo sistema.

[1] K. Fent, A.A. Weston, D. Caminada (2006) Ecotoxicology of human pharmaceuticals. *Aquat Toxicol*; 76,122-159.

[2] M. Gavrilescu, K. Demnerová, J. Aamand, S. Agathos, F. Fava (2015) Emerging pollutants in the environment: present and future challenges in biomonitoring, ecological risks and bioremediation. *New Biotechnol.*, 32, 147-156..

[3] A.V. Dordio, A.J.P. Carvalho (2018) Removal processes of pharmaceuticals in constructed wetlands, in: *Constructed Wetlands for Industrial Wastewater Treatment*, A. Stefanakis (Ed.), John Wiley & Sons Limited, Hoboken, NJ, USA.

WORKSHOPS

W1. Propriedades Nutraceuticas da Dieta Mediterrânica: Potencial Antioxidante e Anti-inflamatório

Responsável: Professora Doutora Maria do Rosário Martins (Departamento de Química da U. Évora)

Local: Sala 134

Nº máximo de participantes: 15

Horário: 17:15-18:45

Descrição: A Dieta Mediterrânica, classificada como Património Imaterial da Humanidade pela UNESCO (2013) inclui um padrão de Alimentação Saudável, na qual o azeite e as plantas aromáticas são uma presença constante. Neste workshop pretende-se dar a conhecer as propriedades antioxidantes e anti-inflamatórias de plantas condimentares da região Alentejo, tão importantes na prevenção de patologias crónicas. Paralelamente, será interpretada a pirâmide alimentar da Dieta Mediterrânica e avaliado o valor energético e proteico de uma refeição.

W2. A grande vitória! (e um caso de morte violenta)

Responsável: Professor Doutor João Nabais (Departamento de Química da U. Évora)

Local: Lab. 025

Nº máximo de participantes: 12

Horário: 17:15-19:15

Descrição: Cenário: II Guerra Mundial. Acontecimento: Homicídio de Michel Dubois. Tarefa: Ajudar o especialista forense René Artois, o qual nas horas vagas era dono do famoso café “The Fallen Madonna”, a apanhar quem cometeu tão hediondo crime.

W3. Métodos alternativos de divulgação científica: Jogos de Tabuleiro

Responsáveis: Lucas Grillo (Aluno de Doutoramento em Química da U. Évora) e Pedro Felício (Presidente do Grupo de Boardgames de Évora)

Local: Sala 126

Nº máximo de participantes: 16

Horário: Horário: 17:15-19:45

Descrição: Neste workshop serão apresentados conceitos científicos e tecnológicos, nomeadamente termodinâmica e máquinas térmicas, com o auxílio de jogos de tabuleiros modernos. Haverá uma curta apresentação dos conceitos e como estes foram introduzidos no mecanismo do jogo, seguida de uma sessão onde os participantes poderão perceber a aplicação dos conceitos através da ferramenta lúdica.

W4. Aplicação da técnica de RMN na determinação da estrutura dos compostos

Responsáveis: Professores Doutores Anthony Burke e António Teixeira (Departamento de Química da U. Évora)

Local: Laboratório 032 e Sala de RMN (CLAV)

Nº máximo de participantes: 15

Horário: 17:15-18:45

Descrição: Neste workshop apresentam-se os princípios básicos em que se baseia a técnica de ressonância magnética nuclear (RMN), a informação que se obtém na análise dos espectros e a sua aplicação na determinação da estrutura dos compostos. Serão ainda apresentadas algumas aplicações importantes desta técnica em diversas áreas. O workshop conta ainda com a preparação de algumas amostras e obtenção dos respetivos espectros.

W5. A importância da qualidade e da segurança dos alimentos no mundo

Responsável: Professor Doutor Miguel Elias (Departamento de Fitotecnia da U. Évora)

Local: Sala 130

Nº máximo de participantes: 30

Horário: 17:15-18:15

Descrição: Serão apresentadas possíveis interpretações dos termos “qualidade” e “segurança dos alimentos”. Debater-se-ão as causas e as consequências da falta de qualidade e de segurança dos alimentos e serão explicados os procedimentos a adoptar para os conseguir. Será abordado o sistema de segurança alimentar baseado na metodologia HACCP e serão feitas divagações sobre a abordagem destes assuntos em vários pontos do mundo.

W6. Empreendedorismo e Inovação

Responsável: Professor Doutor Rui Fragoso (Departamento de Gestão da U. Évora)

Local: Sala 127

Nº máximo de participantes: 30

Horário: 17:15-18:15

Descrição: As palavras da moda “empreendedorismo” e “inovação”, deixam no ar uma promessa de abrir todas as portas e abrir novos mercados, possibilitando eficiência nas empresas e o crescimento económico! Hoje, há uma pressão enorme sobre o gestor para “inovar”, mas muitas vezes isso fica apenas uma palavra, muito falada mas pouco percebida. Existe uma necessidade de ir atrás da moda e este Workshop vai ser uma tentativa para obter uma percepção intuitiva do que é empreendedorismo e inovação.

W7. Introdução à programação em Python para manipulação e visualização de dados

Responsável: Professor Doutor José Saias (Departamento de Informática da U. Évora)

Local: Sala 139

Nº máximo de participantes: 24

Horário: 17:15-19:15

Descrição: Curso curto de Programação na linguagem Python, específica para investigadores. Para além dos fundamentos próprios da linguagem e de mecanismos de controlo de fluxo, serão exploradas técnicas de manipulação e de visualização de dados.

W8. Atenção! Não sejas um perigo! Vem conhecer as regras básicas de segurança em Laboratórios

Responsável: Professora Doutora Cristina Galacho (Departamento de Química da U. Évora)

Local: Lab. 026

Nº máximo de participantes: 12

Horário: 17:15-18:15

Descrição: Workshop sobre Segurança em Laboratórios. Conceitos de Perigo e Risco. Principais Perigos em Laboratórios. Produtos Químicos: Nova classificação e rotulagem (novos pictogramas e fichas de dados de segurança). Equipamentos de Proteção individual (EPI) e equipamentos de proteção coletiva (EPC).

W9. Império dos Sentidos: filme de uma viagem sensorial à volta... do vinho

Responsável: Professor Doutor Paulo Mendes (Departamento de Química da U. Évora)

Local: Sala 154

Nº máximo de participantes: 25

Horário: 17:15-19:15

Descrição: "O conhecimento e a educação sensorial apurada podem obter do vinho prazeres infinitos" (Ernest Hemingway). Partindo desta frase faremos um filme de uma viagem sensorial em que o protagonista é o vinho. Na cadeira de realizador está a Química, que dirige um elenco de moléculas que nos contam a história por detrás do que vemos, cheiramos, sentimos na boca, e até ouvimos, quando provamos um vinho. Os créditos finais vão para todos aqueles que se sintam tentados a colocar os seus sentidos à prova, ficando ou não com os olhos em bico.

ÍNDICE DE AUTORES

Autores	Página(s)
A. C. Valera	40
A. Candeias	10, 11, 16, 35, 36, 41, 46, 49, 50, 51
A. Carneiro	49
A. Ditta	49
A. Goth	14
A. J. Burke	9, 14, 55
A. M. Ramos	39
A. Neto Vaz	47
A. Ramires	23
A. S. Joan	14
A.-F. Maurer	40
A. S. Silva	11
Adelino M. Galvão	7
Ana Elisa Rato	13, 38
Ana Galveias	12, 37
Ana Manhita	43
Ana Margarida Arruda	22
Ana Paula Pinto	33
Ana R. Costa	12, 37
Ana Teresa Caldeira	9, 10, 14, 15, 16, 26, 34, 35, 36, 41, 42, 46, 47, 50, 51
Andreia A. Paleco	45

Autores	Página(s)
Andreia Piçarra	45, 47
Andreia Valente	31
António Amorim	28
António M. T. Martins do Canto	48
António Pereira	15, 16, 34, 41, 51,
António Teixeira	44, 55
Bruna Ramos	17
C. Gil	41
C. Laginhas	23
C. Marques	14
C. Pinto Gomes	47
C. R. Belo	20
Carlo Bottaini	43
Carlos Alexandre	45
Catarina Pronto	48
Cátia Salvador	34, 36, 42, 51
Célia M. Antunes	12, 37
Cristina Barrocas Dias	40, 43
Cristina Galacho	11, 25, 35, 49, 57
D. Domingues	41
Daniela Lopes	44

Autores	Página(s)
Daniele Bortoli	12
Dora Teixeira	33
E. P. Carreiro	14
E. F. Tchikuala	18
F. Grosso	24
Fani Bexiga	47
Fátima C. Teixeira	44
Helena Parente	44
Henrique Vicente	21, 42
I. M. Fonseca	39
I. Žalaitė	40
I. P. P. Cansado	20, 30
Isabel Brito	33
J. M. V. Nabais	18, 23, 54
J. Vital	39
J.E. Castanheiro	39
J. Totobenazara	14
João Letras	36
João Mota Barroso	13, 38
João P. Prates Ramalho	31, 32, 51
Jorge Delgado Nunes	45

Autores	Página(s)
Jorge Ginja Teixeira	17
Jorge M. S. Faria	33
José Carvalho	36
José Mirão	10, 11, 22, 49, 50
José Neves	21
José Saias	57
Khadija Mouhri	26
L. Fernandes	14
Lamiaa Tebaa	26
Laura Prezado	47
Leonor Rocha	43
Liliana Casimiro	34
Loudiki Mohammed	26
Lucas Grillo	55
Luís Alho	33
Luís Dias	10, 50
Luís Lopes	50
M. Beatriz P. P. Oliveira	6
M. C. Queiroga	24
M. Elias	27
M. Fátima Candeias	47

Autores	Página(s)
M. H. Garcia	32
M. J. Fraqueza	27
M. Laranjo	27
M. Plácido	35
M. Rosário Martins	9, 13, 14, 38, 42, 44, 45, 47, 54
Maria Inês Rouxinol	13, 38
Mafalda Costa	22
Mara Silva	10, 34, 41
Margarida Figueiredo	21
Maria J. Costa	12
Marina González-Pérez	16, 46
Mário Carvalho	33
Marisa Guerreiro	47
Marta Otílio	37
Miguel Elias	56
Mountasser Douma	26
N. P. C. Andrade	24
Ooi Su Yin	51
P. Bacalhau	14
P. I. Girginova	11, 35
P. Moita	49

Autores	Página(s)
P. A. M. Mourão	18, 20, 30
Patrícia Bacalhau	9
Patrícia Branco	46
Paulo Ferreira Gomes	28
Paulo J. Mendes	29, 31, 32, 58
Pedro Alves	37
Pedro Barrulas	22, 50
Pedro Felício	55
Peter Vandenabeele	22
Pierre Falson	31
R. C. Guedes	14
R. Veiga	11
Renata C. Madeira	38
Ricardo Vieira	16, 46
Rui Barbosa	22
Rui Dinis	5
Rui Fragoso	56
Rui Salgado	12
Rute Arriegas	12, 37
S. Conceição	27
Sérgio Martins	15, 34, 41, 43

Autores**Página(s)**

Sílvia Arantes	46, 47
Tânia Rosado	10, 41, 50
Vitor Peniche	30
Vlademir Silva	52
Zakaria Tazart	26