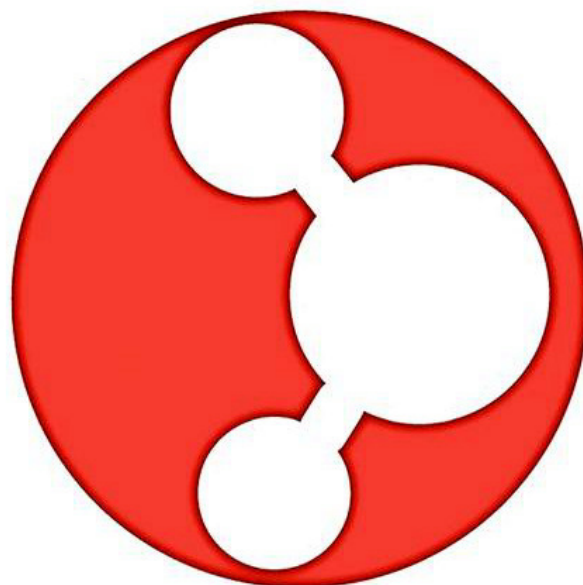




Jornadas do Centro de Química de Évora

25-26 Maio **2011**

Universidade de Évora



Jornadas do Centro de Química de Évora 2011



Programa Científico Livro de Resumos

25 - 26 | Maio | 2011
Universidade de Évora • CLAV • Anfiteatro 4



Entidade Organizadora

Centro de Química de Évora

Comissão Organizadora

III

Peter Carrott

Cristina Galacho

Paulo Mendes

Margarida Figueiredo

Teresa Ferreira

António Teixeira

Patrocínios



Apoios



Título: Jornadas do Centro de Química de Évora 2011

Editores: Peter Carrott, Cristina Galacho, Paulo Mendes, Margarida Figueiredo, Teresa Ferreira e António Teixeira

Edição: Universidade de Évora

Local, Ano de Publicação: Évora, 2011

Tiragem: 30 exemplares

Impressão: Diana Litográfica do Alentejo

Depósito legal nº 328549/11

ISBN: 978-972-778-112-6

Introdução

Peter Carrott

Director do Centro de Química de Évora

O CQE foi criado em 2002 com o objectivo prioritário de apoiar e fomentar na região actividades de investigação, desenvolvimento experimental, formação avançada e prestação de serviços, na área de Química pura ou aplicada. De forma a conseguir este objectivo o CQE sempre tem procurado desenvolver investigação avançada em Química, bem como promover uma variedade de actividades nas áreas de Educação em Química e Divulgação de Química. Foi para nós muito gratificante receber a notícia que o ano de 2011 tinha sido proclamado pelas Nações Unidas como o Ano Internacional da Química, AIQ 2011. Os principais objectivos delineados para o AIQ 2011 visam estimular o reconhecimento da Química como ciência fundamental para a satisfação das necessidades da sociedade moderna, o interesse da Química na população jovem e, ainda, gerar entusiasmo para um futuro cada vez mais criativo da Química. Tendo em conta a coerência entre o âmbito do AIQ 2011 e as actividades do CQE, e consciente do papel central que o CQE deverá assumir na promoção de Química na região, foi criado em 2010 um Grupo de Trabalho com a missão de reforçar e diversificar a nossa oferta. É neste contexto, especificamente na divulgação da investigação científica realizada, que surgem agora as Jornadas do Centro de Química de Évora 2011.

O presente livro contém os resumos das comunicações que serão apresentadas nas Jornadas e que são o resultado de trabalho realizado pelos cerca de 30 investigadores integrados do CQE. Em muitos casos contam com a colaboração de investigadores oriundos de outros Centros de Investigação da Universidade de Évora, bem como de outras Universidades, Instituições e empresas nacionais e estrangeiras. A participação de um número significativo de estudantes de vários cursos da Universidade de Évora, dos 1º, 2º e 3º ciclos, é igualmente notável e sinal do papel central de Química bem como da sua relevância e importância para o desenvolvimento futuro da Universidade de Évora.

Gostaria ainda de aproveitar este espaço para agradecer aos membros do Grupo de Trabalho pelo seu empenho na organização não só das Jornadas, mas também de todas as outras iniciativas associadas ao AIQ 2011 em Évora. Agradeço também a todas as entidades patrocinadoras do AIQ 2011 pelo seu apoio, sem o qual não teria sido possível garantir o sucesso do AIQ 2011 em Évora. Finalmente, gostaria de exprimir o meu sincero desejo de que todos apreciem estas Jornadas e que daqui resulte o estabelecimento de novos laços de amizade e de colaboração científica, assim como o reforço dos já existentes entre os investigadores participantes.

ÍNDICE

Introdução	1
Índice	3
Programa	9

Palestras Convidadas

PC.01	C. Romão <i>Instituto de Tecnologia Química e Biológica, Alfama Lda</i> Terapia com CO: Um desafio para a Química Organometálica	15
PC.02	C. Colaço <i>Repsol Polímeros Lda., Projecto de Ampliação do Complexo Petroquímico de Sines</i> Do Petróleo ao Plástico: Produção de Poliolefinas no Complexo Industrial de Sines	16
PC.03	C. Freire <i>REQUIMTE, Departamento de Química e Bioquímica, FCUP</i> Filling the gap between Coordination Chemistry and Material Science	17
PC.04	Climénia Silva <i>Valorpneu - Sociedade de Gestão de Pneus, Lda</i> O Tratamento dos Pneus Usados em Portugal	18
PC.05	M. Filomena Camões <i>Centro de Ciência Moleculares e Materiais (CCMM) e Departamento de Química e Bioquímica (DQB) da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (FCUL)</i> Mulheres na Química	19

Comunicações Orais

O.01	P.A. Russo, M.M.L. Ribeiro Carrott, P.J.M. Carrott VOC adsorption-desorption by templated mesoporous materials	23
O.02	A.J. Burke Organic Chemistry to Medicinal Chemistry – The Synthesis and Evaluation of Iminocyclitol Inhibitors	24
O.03	Antónia Fialho Conde O Património Documental: um ponto de encontro entre a História e a Química	25

O.04	A. Manhita, T. Ferreira, A. Candeias, C. Dias Estudo material de Tapetes de Arraiolos dos séculos XVII-XIX	26
O.05	M.L.S.C. Esteves, M.R.D.T. Figueiredo, H.A.O.M. Vicente Caracterização do Trabalho Experimental Realizado no Ensino Secundário e Estudo da Importância do mesmo na Aprendizagem da Química	27
O.06	J.M. Valente Nabais, C. Laginhas, S. Román, P.J.M. Carrott, M.M.L. Ribeiro Carrott A vida para além da morte dos produtos agrícolas	28
O.07	S. Valadas, R. Vaz Freire, L. Dias, M. Oliveira, N. Schiavon, C. Dias, J. Mirão, A. Candeias Easel paintings: unrevealing the secrets behind the painting layer	29
O.08	J. Garcia, H. Vicente, J. Arteiro Estudo do Comportamento Ambiental do Azoto em Zonas de Intensa Actividade Pecuária	30
O.09	R.S. Ribeiro, J. Sampaio, A.T Caldeira, M.F Candeias, C. Salvador, J. Arteiro, M.R Martins Actividade antioxidante e efeito hepatoprotector de complexos proteína-polissacárido produzidos por <i>Trametes versicolor</i>	31
O.10	Orlando Silva Simulação do escoamento reactivo de CH₄ numa câmara de combustão	32
O.11	S. Dias, H. Vicente Modelação da Qualidade da Água em Sistemas de Abastecimento Público	33

Comunicações em Pannel

P.01	I.P.P. Cansado, C. Galacho, A.S. Nunes, M.M.L. Ribeiro Carrott, P.J.M. Carrott <i>Using Waste Recycled PET for AC Production for Pesticides Removals from Aqueous Solutions</i>	37
P.02	C. Galacho, M.M.L. Ribeiro Carrott, C. Carvalhal, N. Caixinha, P.A. Russo, P.J.M. Carrott <i>Adsorção/imobilização de fármacos e corantes em materiais mesoporosos ordenados do tipo SBA-15 e MCM-41</i>	38
P.03	I.P.P. Cansado, P.A.M. Mourão, A.I. Falcão, M.M.L. Ribeiro Carrott, P.J.M. Carrott <i>Application of Activated Carbons Modified with NaOH at High Temperature for Phenolic Compounds Removal</i>	39
P.04	P.J.M. Carrott, L.M. Marques, M.M.L. Ribeiro Carrott <i>Application of Pre-adsorption and Density Functional Theory (DFT), for Characterization of the Porosity of Aerogels</i>	40

P.05	S. Pinheiro, C. Galacho, J.M. Valente Nabais, C. Laginhas, M.M.L. Ribeiro Carrott, P.J.M. Carrott Adsorção de paracetamol por carvões activados	41
P.06	A. Galego, J.M. Valente Nabais, C. Galacho, C. Laginhas, M.M.L. Ribeiro Carrott, P.J.M. Carrott Adsorção de metformina por carvões activados	42
P.07	S. Román, B. Ledesma, J.V. Nabais, C. Laginhas Influence of hydrocarbonization conditions on the porosity of derived carbon dioxide activated carbons	43
P.08	F. Sezões, P.A. Russo, M.M.L. Ribeiro Carrott, P.A.M. Mourão, P.J.M. Carrott Adsorption of Bovine Serum Albumin onto Mesocellular Foams: Effect of pore size and surface chemistry	44
P.09	J.M. Valente Nabais, C. Laginhas, P.J.M. Carrott, M.M.L. Ribeiro Carrott To Wash or Not to Wash: That's the Question	45
P.10	C. Herdes, J.M.V. Nabais Characterization of metformin/functional groups associates in aqueous system	46
P.11	Ana M. Santos, Paulo J. Mendes, Tiago J.L. Silva, M.H. Garcia, M. P. Robalo Propriedades de SONLO de complexos organometálicos de Ni e Fe com vista à possibilidade de comutação molecular	47
P.12	Paulo J. Mendes, Tiago J.L. Silva, M.H. Garcia Compostos Organometálicos contendo Anéis Aromáticos Heterocíclicos: Determinação das suas propriedades de Óptica Não Linear	48
P.13	Célia Serrano, Paulo J. Mendes Síntese e estudo de compostos organometálicos/coordenação para as tecnologias da optoelectrónica e fotónica	49
P.14	Tiago J. L. Silva, Paulo J. Mendes, M. H. Garcia Complexos Organometálicos de Ferro (II) e Ruténio (II) como comutadores moleculares: um estudo prático e computacional	50
P.15	D.S. Pito, J.E. Castanheiro Heteropoliácidos como catalisadores ácidos na metoxilação de α-pineno	51
P.16	S. Martins, J. Teixeira, A. Pereira Evaluation of the Antioxidant Activity of New 3-Substituted Coumarin Derivatives by Cyclic Voltammetry	52
P.17	S.M. Martins, P.C. Branco, A.M. Pereira Nova Metodologia para a Síntese de 3-Etenil Coumarinas através de Reacções de Heck	53

P.18	P.D. Santos, A.M.T. M. Canto, A.J.P. Carvalho <i>Molecular dynamics simulations of Palmitoylsphingomyelin and Cholesterol bilayer models in a So phase</i>	54
P.19	L.F.G. Martins, A J.P. Carvalho, J.P.P. Ramalho, E.J.M. Filipe <i>Solubilidades de xénon em hidrocarbonetos por simulação molecular</i>	55
P.20	J. P. Prates Ramalho, F. Illas <i>Theoretical study of azobenzene adsorption on the rutile TiO₂ (110) surface: the role of van der Waals interactions</i>	56
P.21	A. Veiga, J. Teixeira, J. Mirão, A. Candeias, D. Teixeira <i>Voltammetric Study of Copper and Lead Microsamples Immobilized on Carbon Nanotubes Film-Coated Electrode</i>	57
P.22	A.M. Fialho, M.R. Martins, G. Matias, S. Arantes, F.C. Teixeira, A.T. Caldeira, A.P.S. Teixeira <i>Avaliação da Actividade Microbiana de Bisfosfonatos Derivados do Indazole</i>	58
P.23	D. Antunes, A. Pereira, M. Banha, A.T. Caldeira, J.R. Marques da Silva, J.M. Arteiro <i>Biogas production over olive oil mill wastes</i>	59
P.24	M. Silva, C. Serrano, T. Pires, A.P. Carvalho, A.V. Dordio, A.P. Pinto, D.M. Teixeira <i>Remoção e metabolização de Dexametasona por plantas da família das macrófitas</i>	60
P.25	L. Felício, P. Ramos, J. L. Santos, O. Guerreiro, A. Guerra, Z. Velez, L. Garcia, A.T. Caldeira, M. Duarte <i>Valorização dos subprodutos derivados da indústria do azeite: Caracterização biológica dos seus extractos em células humanas de cancro da mama</i>	61
P.26	J. Ferreira, A. Guerra, O. Guerreiro, Z. Velez, P. Ramos, L. Felício, L. Garcia, L. Dias, D. Teixeira, A.T. Caldeira, M. Duarte <i>Efeito antiproliferativo do extracto de culturas de <i>Bacillus amyloliquefaciens</i> em células humanas de cancro da mama</i>	62
P.27	C. Salvador, M.R. Martins, J.M. Arteiro, A.T. Caldeira <i>Amanita ponderosa mushrooms: molecular and inorganic profile and toxicological evaluation</i>	63
P.28	H. Tenda, M. Candeias, M. Pinheiro, I. Alves-Pereira, R. Ferreira <i>Fenilureias diminuem a actividade enzimática glucose-6-P desidrogenase de <i>Saccharomyces cerevisiae</i> UE-ME₃</i>	64
P.29	M. Candeias, I. Alves-Pereira, M.J. Lança, R. Ferreira, P.R. Almeida <i>Expressão diferencial de glutatono S-transferase citoplasmático de juvenis de <i>Petromyzon marinus</i>, L. da bacia do Vouga</i>	65
P.30	J. Agostinho, J. Capela-Pires, R. Ferreira, I. Alves-Pereira <i>Proliferação de <i>Saccharomyces cerevisiae</i> na presença de metais de transição</i>	66

P.31	C. Sousa, M.R. Moita, A.T. Caldeira, M.R. Martins, M. Gil, J. Mirão, A. Candeias <i>Biotechnologia aplicada ao Património: Biodegradação de Pinturas Murais do séc. XVI</i>	67
P.32	M.Gil, A. Ferreira, L. Dias, S. Valadas, A.Cardoso, M.J. Oliveira, M. L. Carvalho, J.Mirão, A. Candeias <i>A paleta e os pigmentos do pintor José de Escobar (séc. XVI-XVII): estudo analítico das pinturas murais do coro-baixo do convento de N^a Sr^a da Saudação (Montemor-o-Novo)</i>	68
P.33	I. Cardoso, M. F. Macedo, S. Valadas, L. Rosado, A. Candeias, J. Mirão <i>As argamassas da cidade romana de Ammaia – um estudo interdisciplinar</i>	69
P.34	L. Rosado, A.E. Candeias, P. Moita, F. Mayet, M.C. Lopes, D. Tavares, R. Alfenim, J. Mirão <i>Cerâmicas da Idade do Ferro II do depósito votivo de Garvão</i>	70
P.35	L. Tobias, H. Mestre, S. Salvador, A. Manhita, D. Teixeira, J. Mirão, A. Candeias, C. Dias, T. Ferreira <i>Textiles: How, What and Why?</i>	71
P.36	J. Carrilho Lopes, J. Munhá, C. Pin, J. Mata <i>Geochemical characterization of alkaline gneissic rocks of Alentejo (Portugal)</i>	72
P.37	M.G.G. Cordeiro, M.R.D.T. Figueiredo <i>Análise comparativa de duas metodologias de ensino na Química de oitavo ano: vantagens e desvantagens da metodologia tradicional e da metodologia Investigativa</i>	73
P.38	N. Caldeira, M. Valente <i>A Experiência de Ørsted - Contributos da História e Filosofia da Ciência para a sua valorização didáctica</i>	74
	Índice de Autores	75

Programa

25 Maio

10:00 - 10:30 Sessão de Abertura

Intervenções do Reitor da Universidade de Évora, Representante do Presidente da Câmara Municipal de Évora, Presidente do Conselho Científico-Pedagógico do IIFA, Director da ECTUE; Director do Centro de Química de Évora, Presidente do Conselho Científico da ECTUE e Director do Departamento de Química da ECTUE

10:30 - 11:00 CQE: No Centro da Química

Peter Carrott. Director do Centro de Química de Évora

11:00 - 11:15 Pausa para café

11:15 - 12:00 Palestra convidada

PC.01. Carlos Romão, *Instituto de Tecnologia Química e Biológica*, Alfama Lda.

Terapia com CO: Um desafio para a Química Organometálica

12:00 - 12:30 Comunicações orais

O.01. P.A. Russo, M.M.L. Ribeiro Carrott, P.J.M. Carrott

VOC adsorption-desorption by templated mesoporous materials

O.02. A.J. Burke.

Organic Chemistry to Medicinal Chemistry – The Synthesis and Evaluation of Iminocyclitol Inhibitors

12:30 - 14:30 Pausa para almoço

14:30 - 15:15 Comunicações Orais

O.03. Antónia Fialho Conde.

O Património Documental: um ponto de encontro entre a História e a Química

O.04. A. Manhita, T. Ferreira, A. Candeias, C. Dias

Estudo material de Tapetes de Arraiolos dos séculos XVII-XIX

O.05. M.L.S.C. Esteves, M.R.D.T. Figueiredo, H.A.O.M. Vicente

Caracterização do Trabalho Experimental Realizado no Ensino Secundário e Estudo da Importância do mesmo na Aprendizagem da Química

15:15 - 15:45 Palestra *Sponsor* “Repsol”

PC.02. C. Colaço, *Repsol Polímeros Lda., Projecto de Ampliação do Complexo Petroquímico de Sines*

Do Petróleo ao Plástico: Produção de Poliolefinas no Complexo Industrial de Sines

15:45 - 16:00 Balanço do Ano Internacional da Química 2011 em Évora

Comissão do CQE | DQUI da ECTUE para o Ano Internacional da Química 2011

16:00 - 16:15 Concurso CSI – Compreender, Saber e Investigar a Química

Apresentação do trabalho vencedor. Entrega do Prémio Repsol

16:15 - 17:30 Comunicações em Painel e *pausa para café*

19:30 Jantar das Jornadas

26 Maio

10:00 - 10:45 Palestra Convidada

PC.03. C. Freire, *REQUIMTE, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade do Porto*

Filling the gap between Coordination Chemistry and Material Science

10:45 - 11:15 Comunicações Orais

O.06. J.M. Valente Nabais, C. Laginhas, S. Román, P.J.M. Carrott, M.M.L. Ribeiro Carrott

A vida para além da morte dos produtos agrícolas

O.07. S. Valadas, R. Vaz Freire, L. Dias, M. Oliveira, N. Schiavon, C. Dias, J. Mirão, A. Candeias

Easel paintings: unrevealing the secrets behind the painting layer

11:15 - 11:30 *Pausa para Café*

11:30 - 12:30 Comunicações Orais

O.08. J. Garcia, H. Vicente, J. Arteiro

Estudo do Comportamento Ambiental do Azoto em Zonas de Intensa Actividade Pecuária

O.09. R.S. Ribeiro, J. Sampaio, A.T. Caldeira, M.F. Candeias, C. Salvador, J. Arteiro, M.R. Martins

Actividade antioxidante e efeito hepatoprotector de complexos proteína-polissacárido produzidos por *Trametes versicolor*

11

O.10. Orlando Silva

Simulação do escoamento reactivo de CH₄ numa câmara de combustão

O.11. S. Dias, H. Vicente

Modelação da Qualidade da Água em Sistemas de Abastecimento Público

12:30 - 14:30 Pausa para almoço

14:30 - 15:00 Palestra Sponsor “Valor Pneu”

PC.04. Climénia Silva, *Valorpneu - Sociedade de Gestão de Pneus, Lda.*

O Tratamento dos Pneus Usados em Portugal

15:00 - 15:45 Palestra Convidada

PC.05. M. Filomena Camões, *Centro de Ciência Moleculares e Materiais (CCMM) e Departamento de Química e Bioquímica (DQB) da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (FCUL)*

Mulheres na Química

15:45 - 16:00 Sessão de Encerramento

Comissão do CQE | DQUI da ECTUE para o Ano Internacional da Química 2011

17:00 - 18:00 Programa Social

Visita à Adega da Cartuxa e prova de Vinhos. Quinta do Valbom

Palestras Convidadas

Terapia com CO: Um desafio para a Química Organometálica

Carlos C. Romão

Instituto de Tecnologia Química e Biológica, Av. da República, EAN, 2780-157, Oeiras

Alfama Lda., Taguspark, núcleo central, 267, 2740-122, Porto Salvo

ccr@itqb.unl.pt

15

O monóxido de carbono (CO) é um gás incolor e inodoro resultante da queima incompleta de muitas substâncias e amplamente reconhecido como altamente tóxico: um assassino silencioso. Do ponto de vista biológico é bem conhecida a sua excepcional afinidade pelas proteínas hémicas, em particular pela hemoglobina cuja função transportadora de oxigénio inibe fortemente.

Paradoxalmente, o CO é produzido no nosso organismo por uma proteína hémica, a oxigenase hémica (OH) que é responsável pela destruição de hemossiderina livre, e cuja expressão é significativamente elevada em estados de doença. De facto, longe de ser um produto tóxico, o CO produzido pela OH nestas pequenas quantidades tem um papel decisivo em diversos mecanismos de defesa das células em situações de stress e inflamação. Estas acções citoprotectoras do CO e os seus benefícios terapêuticos têm sido observados em diferentes patologias, ao ponto de terem sido aceites para testes clínicos em humanos.

No entanto, toxicidade do CO gasoso introduz sérias limitações ao seu uso clínico que necessita de ser apertadamente controlado em ambiente hospitalar e é dependente de equipamento específico.

Como alternativa a estas limitações surgiram propostas para a utilização de moléculas capazes de libertar o CO no organismo, em pequenas quantidades terapêuticas e nos tecidos doentes, de certo modo imitando o papel biológico da OH e reforçando-o. Essas moléculas receberam o nome de CO-RMs (CO Releasing Molecules) e são, na sua maioria, constituídas por complexos organometálicos de metais de transição contendo o ligando CO. A esmagadora maioria do desenvolvimento das CO-RMs tem sido levado a cabo em Portugal, pela acção da Alfama Lda. Os pressupostos racionais deste trabalho suas linhas de desenvolvimento, sucessos e limitações serão apresentados e discutidos nesta comunicação.

Do Petróleo ao Plástico:

Produção de Poliolefinas no Complexo Industrial de Sines

C. Colaço

Repsol Polímeros Lda., Projecto de Ampliação do Complexo Petroquímico de Sines

ccolaco@repsol.com

16

Apresentação sumária da cadeia de valor de uma empresa petrolífera integrada: exploração e produção, petróleo e gás natural, refinação, petroquímica básica e derivada

A Repsol no Mundo e suas áreas de negócio: Upstream, GNL, Downstream, YPF e Gas Natural SDG. Plano estratégico 2008-2012

Dimensão do grupo Repsol YPF: número de postos de trabalho, volume de produção de hidrocarbonetos, capacidade de refinação, distribuição de combustíveis, capacidade de produção da Química na Europa, volume de vendas de GPL (butano e propano) e distribuição gás natural.

Petroquímica Repsol na Península Ibérica.

Breve história do Complexo Petroquímico de Sines. Localização do complexo e do terminal portuário.

Configuração actual do complexo e cenário para futura configuração.

Critérios para a escolha de um processo de fabrico de polietileno: ponto de vista da gama de produtos e ponto de vista de segurança, impacte ambiental, custo de investimento e de exploração

Fábricas de poliolefinas existentes no complexo de Sines:

Polietileno de alta densidade (PEAD): processo de fabrico, produto final e aplicações

Polietileno de baixa densidade (PEBD): Processo de fabrico, Produtos finais e aplicações

Novas fábricas de poliolefinas:

Polietileno linear e polipropileno. Processos de fabrico, produtos e aplicações.

Filling the gap between Coordination Chemistry and Material Science

C. Freire

*REQUIMTE, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade do Porto,
Rua do Campo Alegre, 4169-007 Porto, Portugal
acfreire@fc.up.pt*

17

Transition metal complexes constitute one of the most promising groups of inorganic compounds with a variety of structures and tuned electronic/magnetic properties that make them versatile building blocks for the preparation of materials with tailored properties. They have been immobilized in several bulk materials and as coordination polymers, but in the era of Nanosciences and Nanotechnology, nanomaterials and nanostructured films based on transition metal complexes are a very important and recent area of research, since they can combine the specific properties of metal complexes with nanometric size of materials and film nanostructure.

One of our topics of interest is the immobilisation of [M(*salen*)] and [M(*porphyrin*)] complexes in nanomaterials, such as carbon nanomaterials (carbon nanotubes, nanospheres), nanosilicas and magnetic nanomaterials for application in heterogeneous catalysis. In this context, novel procedures for the preparation of nanosilicas and magnetic nanomaterials, as well as new methods for the derivatisation of carbon materials have been developed;^{1,2} these new nanomaterials can ultimately be used for the fabrication of technical materials. Other topic of interest, is the heterogenisation of [M(*salen*)] complexes by: i) electropolymerisation, to give conducting polymers,³ or ii) by layer-by-layer self-assembly to give nanolayered films.⁴ The conducting films present electrochromic properties (can be used to fabricate electrochromic devices)⁵ and when the complexes are functionalised with receptor groups, both the two types of nanostructured films can act as heterogeneous sensors for metal ions.

[1] C. Pereira, A. M. Pereira, P. Quaresma, P. B. Tavares, E. Pereira, J. P. Araújo, C. Freire. Dalton Trans. 39 (2010) 2842.

[2] H. Gaspar, C. Pereira, S. L.H. Rebelo, M. F. R. Pereira, J. L. Figueiredo, C. Freire. *Carbon*, (2011), in press, DOI: 10.1016/j.carbon.2011.04.041.

[3] J. Fonseca, J. Tedim, K. Biernacki, A. L. Magalhães, S. J. Gurman, C. Freire, A. R. Hillman. *Electrochim. Acta*, 55 (2010) 7726.

[4] S. Patrício, A. I. Cruz, K. Biernacki, J. Ventura, P. Eaton, A. L. Magalhães, C. Moura, A. R. Hillman, C. Freire. *Langmuir*, 26 (2010) 10842.

[5] A. Branco, C. Pinheiro, J. Fonseca, J. Tedim, A. Carneiro, A. J. Parola, C. Freire, F. Pina. *Electrochem. Solid-State Lett.* 13 (2010) J114.

O Tratamento dos Pneus Usados em Portugal

C. Silva

Valorpneu - Sociedade de Gestão de Pneus, Lda

valorpneu@valorpneu.pt

18

A Valorpneu organiza e gere o sistema de recolha e encaminhamento para destino final dos pneus usados. Com 9 anos de actividade a Valorpneu é uma empresa com total abrangência nacional, com um elevado número de produtores aderentes e com objectivos de recolha e reciclagem atingidos de forma consistente ao longo dos anos. A Valorpneu tem-se revelado uma empresa que conseguiu mudar mentalidades e concretizar uma efectiva recolha e valorização dos pneus. Desde o início do sistema e até agora já foram valorizadas mais de 730.000 toneladas de pneus. O fluxo dos pneus usados é actualmente um sistema consolidado, com um modelo operacional estável e que tem apresentado um elevado desempenho.

No sistema gerido pela Valorpneu os pneus usados são reconstruídos, reciclados e são valorizados energeticamente.

A recauchutagem é o processo industrial que permite a reconstrução do pneu, através da aplicação de um novo piso e de novas paredes laterais, prolongando assim a sua vida útil.

Através da valorização energética é aproveitado o valor calorífico do pneu, que é semelhante ao do carvão. O pneu inteiro ou fragmentado é um substituto do combustível tradicional e é utilizado por cimenteiras e unidades de co-geração de energia.

O processo de reciclagem do pneu passa pela decomposição nos materiais que o constituem, essencialmente borracha, aço e têxtil. O têxtil é encaminhado para valorização energética, o aço do pneu é reutilizado na indústria siderúrgica e a borracha, transformada em diferentes dimensões de granulado, é utilizada no enchimento dos campos de relva sintética, nos pavimentos desportivos e recintos recreativos, em pisos de picadeiros, nas misturas betuminosas com borracha para utilização nas vias rodoviárias, entre outras aplicações.

Mas, outros desafios se colocam na gestão dos pneus em fim de vida. A investigação e o desenvolvimento são factores fundamentais para a sustentabilidade deste fluxo. É necessário que o meio académico e científico se envolva nesta causa para que novas aplicações e novos produtos derivados de pneus usados venham a surgir. Os pneus em fim de vida são uma matéria-prima secundária que oferece inúmeras possibilidades de valorização e aplicação, com total respeito pelas especificações ambientais.

Agradeço à organização das Jornadas CQE 2011 a oportunidade da Valorpneu se juntar à celebração do IYC.

Mulheres na Química

M. Filomena Camões

*Centro de Ciência Moleculares e Materiais (CCMM) e Departamento de Química e Bioquímica (DQB)
da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (FCUL)
fcamoes@fc.ul.pt*

O símbolo utilizado em biologia para o sexo feminino representa também o planeta Vénus, estrela da manhã ou estrela da tarde, e na Alquimia referia-se ao metal cobre e ao seu minério verde, associado ao elemento terra e à operação de Conjunção. O símbolo para o sexo masculino é o de Marte, ferro, cor vermelha e é associado com Separação.

No Ano Internacional da Química (IYC 2011), decisão conjunta da UNESCO e da IUPAC, a Directora-Geral da UNESCO é uma mulher, Irina Bokova e a Presidente da IUPAC é outra mulher, Nicole Moreau. Ocorrendo nesta ocasião o 1º centenário da atribuição do Prémio Nobel da Química a Marie Skłodowska-Curie, o primeiro a ser atribuído a uma mulher, a efeméride levou a que a homenagem a Madame Curie tenha sido o tema de abertura do IYC2011 e constitua motivo de muitas e variadas homenagens, por homens e mulheres quer do seu país de origem, a Polónia, quer pelo mundo inteiro. O Prémio foi-lhe atribuído pela descoberta dos elementos rádio, Ra, e polónio, Po, depois de, em 1903 já ter dividido o Prémio Nobel da Física com seu marido, Pierre Curie, e Becquerel, pelas descobertas sobre radioactividade. Sobre o marido, falecido por atropelamento em 1906, Marie Curie escreveu “Pierre Curie dedicou a sua vida ao seu sonho científico; ele precisou de uma companheira com quem partilhasse esse sonho”. O Nobel da Química foi-lhe atribuído no mesmo ano em que a Academia de Ciências de Paris a tinha rejeitado como sócia. O Instituto de França tinha exprimido publicamente a sua intenção de manter o seu estatuto de “só para homens”. Não voltou a candidatar-se. Mais tarde a Academia de Medicina convidou-a para seu membro como reconhecimento pelo papel do rádio na terapia do cancro; Marie Curie aceitou. Entre 1904 e 1934, ano da sua morte, 47 mulheres trabalharam como investigadoras no seu laboratório; uma delas, portuguesa, foi Branca Edmée Marques, Assistente da FCUL. Já casada, foi para Paris em 1931, acompanhada pela mãe; realizou o doutoramento em 1935. No regresso, criou o Laboratório de Radioquímica, em 1938-1939. Não sendo admitida a concurso para Professor Catedrático, em 1954, cegou de um olho no próprio dia; em 1966, foi a primeira Catedrática numa Faculdade de Ciências, em Portugal. A Professora Branca foi minha Professora de Química Inorgânica; de memória ficou-me a sua descrição exaustiva dos elementos da Tabela Periódica. Por força de todas estas coincidências, este ano, por iniciativa do DQB-FCUL, foi pintada no pátio de acesso ao edifício C8 da FCUL, a Tabela Periódica actualizada!

Comunicações Orais

VOC adsorption-desorption by templated mesoporous materials

P.A. Russo, M.M.L. Ribeiro Carrott, P.J.M. Carrott

*Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE**manrc@uevora.pt*

23

Volatile organic compounds (VOCs) emitted to the atmosphere can contribute to a variety of environmental problems and, in particular, aromatic hydrocarbons are extremely dangerous for human health. Additionally, hydrocarbon separation and purification is a matter of great interest and practical importance. Adsorption by porous solids has been proven to be a suitable method for the removal of pollutants from different media and has the advantage of being a non-destructive method, meaning that the adsorbed substances can be recovered and reused. However, several materials not only adsorb indiscriminately all the VOCs but also require high temperatures with additional costs for the full regeneration of adsorbents and recovery of the compounds. In this work, the adsorption-desorption isotherms of several aromatic and aliphatic hydrocarbons were measured on: silicas with unidirectional cylindrical mesopores (MCM-41 and SBA-15) of various diameters, with a 3D cylindrical channel system (MCM-48) or with spheroidal mesopores connected by narrower entrances (SBA-16, LPC and MCF); silicas containing surface chloromethyl groups; a hybrid silica-benzene and a CMK-3 mesoporous carbon. In some of these systems, the isotherms were measured at different temperatures. All the materials showed very high adsorption capacities for the VOCs, but distinct and interesting behaviour was found according to the exact pore structural characteristics. For instance [1], a clear separation between aliphatic and aromatic hydrocarbons was observed at low p/p^0 for the silica materials having pores accessible by narrow openings and, interestingly, these caused an increase in the volume adsorbed of methylcyclohexane and n-pentane that did not occur for neopentane. Additionally, emptying of these pores occurs by cavitation, at different pressures for the hydrocarbons and even at very low temperatures. The incorporation of aromatic rings into the silica pore walls favours the affinity of the surface for all the hydrocarbons, while the modification of the surface chemistry by chloromethyl groups, in low amounts, has an unfavourable effect for the aromatic but not for the aliphatic hydrocarbons. The results show the possibility of fine tuning the structure and surface chemistry of OMM for VOC adsorption and separation and allowed us to identify the most suitable materials for this purpose, demonstrating the interest of OMM beyond being nice ideal model solids for testing theories.

[1] P.A. Russo, M.M.L. Ribeiro Carrott, P.J.M. Carrott, New J. Chem. 35 (2011) 407-416.

Acknowledgments. This work was financially supported by FEDER funds through the Programa Operacional Factores de Competitividade – COMPETE & by National funds through FCT – Fundação para a Ciência e a Tecnologia under project FCOMP-01-0124-FEDER-007145 and Ph. D. grant no. SFRH/BD\17713\2004 (P. A. R.).

Organic Chemistry to Medicinal Chemistry – The Synthesis and Evaluation of Iminocyclitol Inhibitors

A.J. Burke

Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE

ajb@uevora.pt

24

The iminocyclitols – polyhydroxylated pyrrolidines and piperidines - are a family of important pharmacologically active compounds that are both potent glycosidase and glycosyltransferase inhibitors due to their mimicry of the transition state of the enzymatic reactions and via serendipitous electrostatic binding interactions.^[1] For this reason they have been selected as therapeutic agents in several areas, such as cancer, viral infections (particularly influenza) and diabetes, etc. For example, deoxinojirimicin (DNJ) **1** is an inhibitor of endoplasmic reticulum α -glucosidases I and 1,4-dideoxy-1,4-imino-D-arabitol (DAB-1) **2** and 2,5-dideoxy-2,5-imino-D-mannitol (DMDP) **3** are powerful inhibitors of α -glucosidases (Fig. 1). The synthesis of simple potent novel analogues of these compounds is an important goal in medicinal chemistry, not only for targeting human disease, but also as tools to probe the mechanism of glycosidase function. We have made some important contributions to these area.^[2]

In this communication our recent investigations on the synthesis, screening and determination of the mechanism of action of very simple iminocyclitol inhibitors will be discussed.

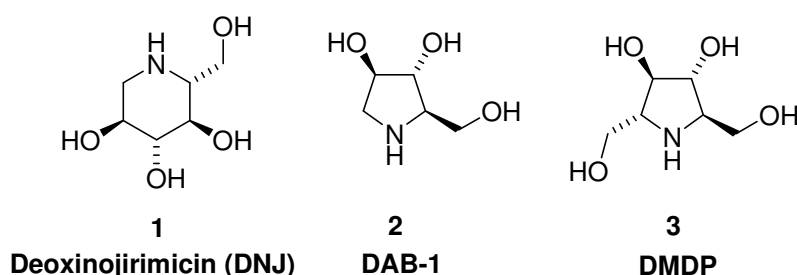


Figure 1

[1] V.H. Lillelund, H.H. Jensen, X. Liang, M. Bols, *Chem. Rev.* **2002**, 102, 515.

[2] R.L. Guerreiro, L. Fernandes, A.T. Caldeira, R. Guedes, R. Moreira, A.J. Burke, *Eur. J. Med Chem.* submitted.

O Património Documental: um ponto de encontro entre a História e a Química

Antónia Fialho Conde

Departamento de História da Universidade de Évora/CIDEHUS/HERCULES

mconde@uevora.pt

O Património Documental permite abordagens diversas, sendo que uma das mais desafiantes é a que pode ser assumida pela aliança que a História e a Química podem estabelecer. Esse mesmo Património, em diversos suportes (de que destacamos o pergamináceo), é aliás cada vez mais abordado nesta dupla perspectiva, propiciando o Laboratório HERCULES excelentes oportunidades neste domínio. Pretende-se com esta comunicação realçar a importância da informação de cariz técnico-científica traduzida num conjunto de receitas para colorações de mapas existentes num manuscrito setecentista da Biblioteca Pública de Évora (posteriormente impressas numa obra de Azevedo Fortes) e que nos ajudam a interpretar/descodificar dados essenciais existentes na cartografia, marcando claramente distintas épocas na feitura deste tipo de material.

Estudo material de Tapetes de Arraiolos dos séculos XVII-XIXA. Manhita¹, T.Ferreira¹, A. Candeias^{1,2}, C. Dias¹¹Lab. HERCULES & CQE & DQ/ECTUE, ²Instituto dos Museus e Conservação, Lisboa
anaccm@uevora.pt

26

As tapeçarias bordadas de Arraiolos constituem, sem dúvida, uma das mais interessantes indústrias artísticas populares nascidas em Portugal. A sua produção remonta ao século XVII, tendo sido descritos nos inventários de casas aristocráticas da época. Os tapetes consistem num bordado de lã sobre uma tela de linho ou cânhamo. A sua datação é difícil e normalmente é feita apenas com base em pormenores estilísticos.

Neste trabalho, estudou-se um conjunto de tapeçarias pertencentes à colecção de Tapetes de Arraiolos do Museu Nacional de Arte Antiga (séculos XVII-XIX) com o objectivo de identificar os materiais utilizados no seu fabrico (fibras, corantes e mordentes) e perceber se é possível definir uma escala temporal na utilização desses materiais.

Após extracção a partir das fibras de lã, a identificação de corantes naturais foi feita por LC-DAD-MS. A identificação de mordentes foi feita por SEM-EDX e a sua quantificação por ICP-MS. A microscopia electrónica de varrimento foi ainda utilizada na avaliação da morfologia das fibras têxteis e do seu estado de degradação e das várias patologias que apresentam.

Como esperado, o alúmen foi o mordente mais detectado nas amostras – até mesmo em amostras azuis – embora também tenha sido assinalada a presença de ferro, cobre e zinco.

São escassos os relatos históricos sobre a tinturaria de Arraiolos [1,2], e nos existentes apenas é descrita a utilização dos corantes naturais índigo, pau-brasil, trovisco, pau-campeche e lírio-dos-tintureiros. Contudo, a análise por LC-DAD-MS permitiu ainda a detecção de garança e cochinhilha.

A degradação das cores é visível na maioria dos tapetes estudados, e em algumas áreas bordadas que apresentam hoje em dia tons amarelos, foram detectados cromóforos amarelos e vermelhos ou os seus produtos de fotodegradação, sugerindo que a lã teria sido originalmente tingida com um tom laranja. Estes resultados foram confirmados utilizando amostras de lã tingidas em laboratório com corantes naturais e que foram sujeitas a fotodegradação acelerada numa câmara de envelhecimento. O estudo realizado nas tapeçarias de Arraiolos contribuiu para melhorar o conhecimento acerca desta indústria popular, complementando os poucos relatos históricos disponíveis.

[1] D. José Pessanha, Tapetes de Arraiolos, O Archeologo Português, Vol. XI, n.ºs 5-8 (1906) 3-11.

[2] J.H. Cunha Rivara, Memórias da Vila de Arraiolos, Vol. 2, Câmara Municipal de Arraiolos (1985).

Caracterização do Trabalho Experimental Realizado no Ensino Secundário e Estudo da Importância do mesmo na Aprendizagem da Química

M.L.S.C. Esteves¹, M.R.D.T. Figueiredo², H.A.O.M. Vicente²

¹*Escola Secundária de Mem Martins*

²*Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE*

mtf@uevora.pt

27

A Química, enquanto disciplina individual ou integrada na disciplina de Ciências Físico-Químicas, atravessa tempos difíceis. Considerada pelos alunos uma disciplina difícil, ela é, muitas vezes, preterida em relação a outras onde conseguem obter melhores resultados. Contudo, a Química dispõe de um recurso com potencialidades enormes no que se refere à motivação dos alunos: o Trabalho experimental.

Nos currículos é-lhe atribuído um papel preponderante, contudo, na prática, verifica-se que nem sempre isso acontece. Verificar até que ponto existem condições nas escolas para a sua concretização e para que os professores reconheçam essa importância e a ponham em prática, são questões que devemos colocar e às quais pretendemos, com a realização deste estudo, dar resposta. Caracterizar o tipo de Trabalho Experimental que é realizado nas Escolas Secundárias e avaliar qual a importância que ainda lhe é atribuída, por professores e alunos, constituíram, por isso, os grandes objectivos deste estudo.

Este estudo, desenvolvido no âmbito da elaboração da dissertação de Mestrado em Química em Contexto Escolar foi efectuado com professores que leccionaram a disciplina de Física e Química A, e alunos que frequentaram esta disciplina no 10º e 11º ano, no ano lectivo 2008/2009. Foi alargado a Escolas, públicas e privadas, de várias regiões do País, com o intuito de obter um maior leque de resultados e de estudar eventuais diferenças.

A metodologia seguida baseou-se recolha de dados através da aplicação de inquéritos por questionário, tendo sido os dados analisados com recurso a métodos de Descoberta de Conhecimento em Bases de Dados. Optou-se pela Aproximação de Vizinhanças na tarefa de segmentação e pelas Árvores de Decisão para gerar modelos explicativos dos segmentos encontrados, de forma a atribuir um novo caso a um dado segmento.

Os resultados obtidos permitiram concluir que, independentemente da metodologia seguida, dos maiores ou menores recursos, a aposta na actividade do aluno e na realização de actividades experimentais constitui uma estratégia muito rica numa disciplina como a Química que é, por excelência, uma ciência experimental.

A vida para além da morte dos produtos agrícolasJ.M. Valente Nabais¹, C. Laginhas¹, S. Román², P.J.M. Carrott¹, M.M.L. Ribeiro Carrott¹¹Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE²Universidad Extremadura, Badajoz, Espanha

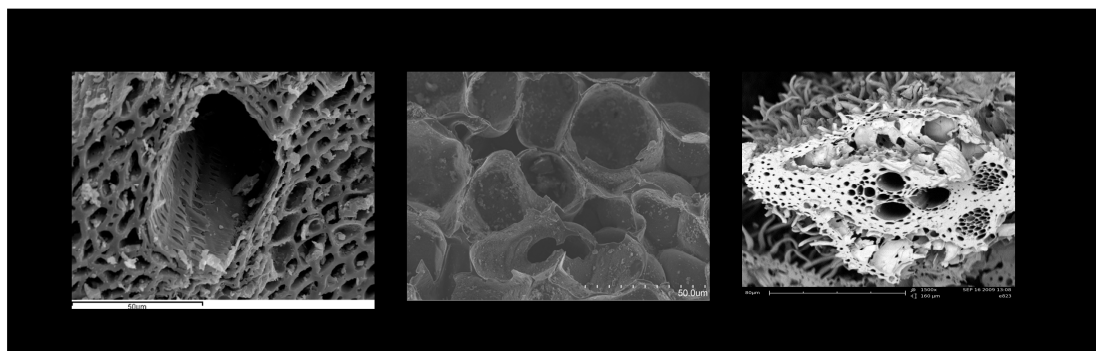
jvn@uevora.pt

28

Este trabalho vai dar resposta a uma pergunta corrente: Há vida para além da morte no caso dos produtos agrícolas? A resposta é sim! Nesta apresentação iremos mostrar uma reencarnação de vários subprodutos agrícolas e resíduos industriais biomássicos na forma de carvões activados, um produto de valor acrescentado. A biomassa estudada consistiu em girassol, videira, casca de amêndoa, endocarpo de café, esparto, colza e kenaf, entre outros. A reencarnação foi efectuada por activação com vapor de água e dióxido de carbono a 700 e 800°C num forno horizontal. Os superpoderes dos carvões produzidos foram testados por FTIR, análise elementar, adsorção de azoto a 77K, DRX, SEM e ponto de carga zero (pzc). Estes superpoderes foram depois usados para combater alguns vilões, vulgo poluentes, da lista dos 10 mais procurados pela *Environmental Protection Agency* e *European Union*, designadamente fenol e mercúrio.

Das dezenas de ensaios de reencarnação efectuados produzimos carvões activados de uma forma geral básicos, com pzc superior a 9, com uma estrutura porosa desenvolvida com área aparente BET até cerca de 1500m²/g e volume poroso até cerca de 0,6cm³/g.

A batalha da adsorção dos poluentes revelou-se difícil mas, após alguns recuos e mudanças de estratégia, foi definitivamente ganha por alguns carvões activados que conseguiram remover de circulação uma quantidade superior de elementos dos bandos dos malfeitores fenol e mercúrio, quando comparado com outros estudos já reportados na literatura, a título de exemplo foram atingidos níveis de 190mg/g para o fenol e 1104mg/g para Hg²⁺, 771mg/g para [HgCl₄]²⁻ e 966mg/g para HgCl₂.



Agradecimentos. Os autores agradecem à FCT, COMPETE, QREN e União Europeia (FEDER) pelo financiamento através do projecto FCOMP-01-0124-FEDER-007142.

Easel paintings: Unraveling the secrets behind the painting layer

S. Valadas¹, R. Vaz Freire¹, L. Dias¹, M. Oliveira¹, N. Schiavon³, C. Dias¹, J. Mirão³, A. Candeias^{2,5}

¹Lab. HERCULES & CQE, ²Lab. HERCULES & CQE & DQ/ECTUE, ³Lab. HERCULES & CGE, ⁴Lab. HERCULES & CGE & DGeol/ECTUE, ⁵Museums and Conservation Institute, Lisbon, Portugal.
candeias@uevora.pt

The History of Western Art is often associated with the History of Painting. In fact, although clearly unfair to other forms of art, this reflects the importance of this kind of artistic expression in the minds of individuals. Numerous studies look into the style and technique of the easel paintings to get information well beyond the obvious. Occasionally some abuse (see *The Da Vinci Code* by Dan Brown) results in literary works of dubious quality, reaching conclusions clearly beyond what can be inferred with the proposed methodology.

Painting materials contain information about the authors and their contemporaneous society in the motifs they paint. Moreover, like any other perennial object, easel paintings are on permanent degradation. Thus, conservation works are constant, and restoration, albeit occasional, is fundamental to the full enjoyment of the art object. Proper conservation and restoration requires the knowledge of materials used in their making.

The identification of materials used in easel paintings requires the use of techniques for imaging, chemical analysis and phase analysis (including organic and inorganic). The very nature of these objects requires the extensive use of *in-situ* analysis and of microscopic analytical techniques using micro-samples.

The Laboratory HERCULES is committed to the study material of easel paintings, with special emphasis on the XV to XVIII centuries. The methodology used relies on analysis of the painted area with photography done with visible and ultraviolet light. Photography with InGaAs infrared detectors (reflectography), allows access to the underlying drawing, important to understand the initial conception of the painting by the artist.

In-situ analysis by X-ray fluorescence enables the identification of the main chemical elements and their relative abundance in the painting layer. The major compounds, organic and inorganic, can also be identified by vibrational spectroscopy, including FTIR and Raman. Sometimes the analysis of micro-samples is essential, enabling the unequivocal identification of organic compounds by LC-MS or GC-MS. Moreover, the assembly of micro-samples oriented in epoxy resin, cross sections, allows the visualization of the complexity of the work and the approach of the painter to set out a particular aesthetic output. The sequence of layers can be obtained by optical microscope and the details of these layers, as well as its composition can be acquired using SEM-EDS. Any doubts about the phase composition can be further resolved using micro-diffraction and Raman microscopy and / or FTIR microscopy.

Estudo do Comportamento Ambiental do Azoto em Zonas de Intensa Actividade Pecuária

J. Garcia¹, H. Vicente², J. Arteiro²

¹*Comissão de Coordenação e Desenvolvimento Regional do Alentejo*

²*Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE*

jsantosgarcia@gmail.com

30

O ciclo do azoto é um dos ciclos biogeoquímicos mais complexos, cuja compreensão apresenta elevada dificuldade, devido às inúmeras formas que o azoto pode tomar. A cada forma corresponde um composto com características próprias e diferentes potenciais de reacção e, em consequência, com diversas formas de interacção com o meio, possibilitando aos seres vivos modos distintos de utilização.

O azoto, na sua forma orgânica, é um factor fundamental na regulação da produtividade dos sistemas ecológicos terrestres, e a sua concentração no solo mantém-se aproximadamente constante, independentemente dos diversos usos a que este possa ser sujeito. Os teores de azoto nas suas formas inorgânicas, por seu lado, podem estar sujeitos a grandes variações, em função do tipo de uso a que o solo está sujeito.

A interferência humana rompeu o equilíbrio natural deste ciclo, introduzindo artificialmente, nos diversos ecossistemas, grandes quantidades de azoto de origem antropogénica, sob formas inorgânicas que, por serem instáveis e facilmente lixiviáveis, não permitem a sua transformação em azoto orgânico contribuindo, de forma decisiva, para a poluição do ar, do solo e das águas superficiais e subterrâneas.

Com este trabalho pretende-se dar uma pequena contribuição para uma sistematização do conhecimento produzido nos últimos anos relativo ao papel desempenhado pelas explorações pecuárias intensivas na poluição, resultante de um excesso de azoto libertado para o solo, água (superficial e subterrânea) e atmosfera.

Pretende-se, ainda, analisar o que tem sido feito em Portugal no controlo da poluição por azoto de origem agrícola, a nível de acções governamentais, ou seja, através das medidas, orientações e decisões impostas através de legislação, regulamentações e apoios. Será analisada a legislação, passada e actual, relativa a este assunto, bem como aquela que regulamenta a actividade pecuária em particular.

Actividade antioxidante e efeito hepatoprotector de complexos proteína-polissacárido produzidos por *Trametes versicolor*

R.S. Ribeiro¹, J. Sampaio¹, A.T. Caldeira^{1,2}, M.F. Candeias^{1,3}, C. Salvador^{1,2,3},
J. Arteiro^{1,2}, M.R. Martins^{1,3}

¹Departamento de Química da ECT, Universidade de Évora, ²Centro de Química de Évora, Universidade de Évora, ³Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas, Universidade de Évora
atc@uevora.pt

Alguns cogumelos do grupo *White rot fungi*, nos quais se incluem as estirpes de *Trametes versicolor*, apresentam importantes propriedades medicinais, nomeadamente anti-oxidantes, anti-microbianas, anti-virais e anti-tumorais. Em estudos anteriores foi possível otimizar a produção de complexos proteína-polissacárido extra e intra-celulares por culturas de *T. versicolor* utilizando diversos substratos como fonte de carbono e avaliar algumas das propriedades antioxidantes dos complexos produzidos [1]. Neste trabalho pretendeu-se avaliar a actividade antioxidante e hepatoprotectora de extractos extracelulares ricos em complexos proteína-polissacárido, produzidos por culturas líquidas de *T. versicolor* utilizando resíduos de girassol como fonte de carbono. A actividade antioxidante dos extractos liofilizados foi determinada pelos métodos do DPPH e β -caroteno/ácido linoleico. O efeito hepatoprotector dos extractos liofilizados foi avaliado *in vivo*, procedendo-se à administração dos compostos por via oral, em ratos *Wistar* (0,25 g/Kg), durante 10 dias. Após este período, os animais foram submetidos a uma administração de etanol (5,0 g/Kg), por via oral, e sacrificados 18 h depois. As actividades enzimáticas alanina aminotransferase (ALT), aspartato aminotransferase (AST), fosfatase alcalina (ALP) e gama-glutamyl-transferase (γ GT) foram determinadas no soro dos animais. Os resultados obtidos mostraram que os extractos liofilizados apresentaram elevada actividade antioxidante, com percentagens de inibição de oxidação superiores a 50%. Os complexos proteína-polissacárido de *T. versicolor* administrados oralmente mostraram eficácia na redução dos danos hepáticos induzidos pelo etanol, sugerindo apresentar efeito hepatoprotector, podendo ser utilizados como co-adjuvantes nutritivos no tratamento de doenças hepáticas.

[1] Arteiro, J. M., Martins, M.R., Salvador, C., Candeias, M. F., Karmali, A., Caldeira, A. T. (2011). Protein-Polysaccharides of *Trametes versicolor*: Production and Biological Activities. *Medicinal Chemistry Research*, DOI: 10.1007/s00044-011-9604-6.

Agradecimentos: Este trabalho foi financiado pelo projecto PTDC/AGR-AAM/74526/2006 da FCT

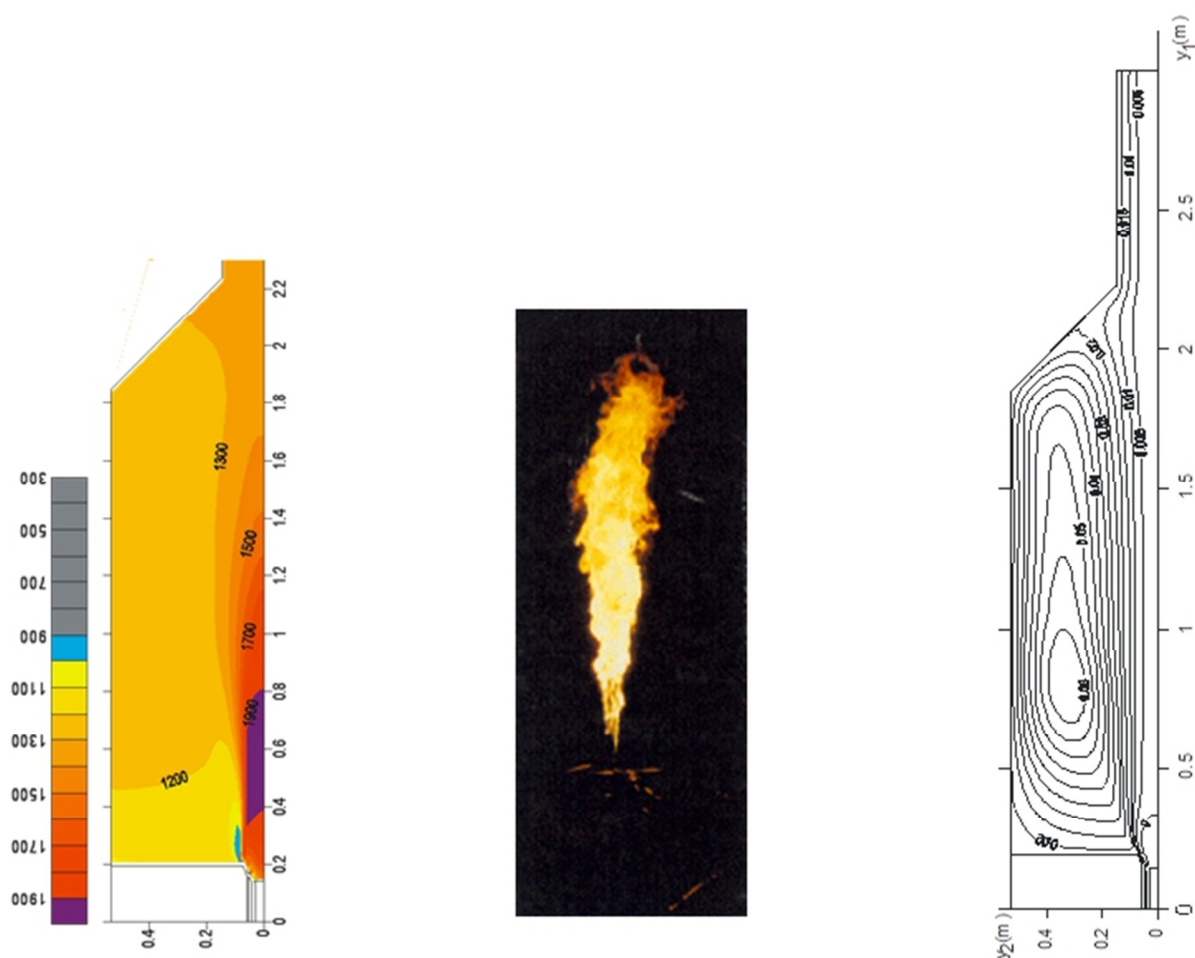
Simulação do escoamento reactivo de CH_4 numa câmara de combustão

Orlando Silva

Universidade de Évora

orlando@uevora.pt

A combustão de metano numa câmara de combustão em regime turbulento é modelada com base nas equações de transporte de grandezas físicas da mistura gasosa. A evolução da composição da mistura é determinada por intermédio das taxas de reacção entre 17 espécies químicas sujeitas, neste modelo, a 58 reacções elementares.



O estado da mistura gasosa – modelada pela sua composição, equações de transporte da massa, momento linear, energia e espécies químicas, sujeita a condições de fronteira numa câmara de combustão – é calculado por resolução das equações referidas. Estas equações são resolvidas por intermédio de métodos numéricos, nomeadamente o método dos volumes finitos. Como resultados obtêm-se os campos das densidades das espécies químicas, temperatura, velocidade do escoamento e pressão.

Modelação da Qualidade da Água em Sistemas de Abastecimento Público

S. Dias¹, H. Vicente²

¹Administração Regional de Saúde do Alentejo IP, Laboratório de Saúde Pública de Évora

²Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE

Susana.Dias@arsalentejo.min-saude.pt

A água, enquanto composto dotado de características físico-químicas próprias que afectam e condicionam o seu uso, não se encontra na Natureza no estado puro, i.e. incolor, inodora e insípida. Na verdade, encontra-se associada a outras substâncias que afectam e condicionam os seus possíveis usos. A qualidade de uma água pode, então, ser definida como sendo aquilo que caracteriza a sua adaptabilidade para determinados fins, devendo-se ter sempre presente que nenhuma água é de boa qualidade para todos os usos.

O Programa de Vigilância Sanitária, estabelecido pela Autoridade de Saúde, visa controlar a qualidade da água de abastecimento público. Esta autoridade divide os parâmetros de qualidade da água em três grupos distintos (P_1 , P_2 e P_3) para os quais a frequência de amostragem é diferente. Assim, há todo o interesse no desenvolvimento de modelos de previsão os parâmetros químicos incluídos no grupo P_2 (manganês e nitrato) e incluídos no grupo P_3 (potássio e sódio), para o qual a frequência de amostragem é menor, com base nos parâmetros químicos incluídos no grupo P_1 (pH e condutividade). No presente trabalho foram utilizadas Redes Neurais Artificiais (RNAs) para prever a concentração de nitrato, manganês potássio e sódio com base nos valores de pH e de condutividade. Elaboraram-se, testaram-se e avaliaram-se diversas topologias de rede tendo sido utilizado como critério de selecção a minimização quer do desvio absoluto médio quer da média do quadrado dos erros [1].

Foram ainda desenvolvidos modelos de segmentação utilizando os parâmetros químicos incluídos no grupo P_1 , tendo-se recorrido à estratégia *k-means*. Os modelos obtidos revelam diferenças entre as propriedades físico-químicas das águas dos diversos concelhos analisados permitindo, após a construção de modelos explicativos da segmentação, caracterizar e separar as amostras provenientes de origem subterrânea das amostras relativas a águas de origem superficial.

[1] S. Haykin, Neural Networks and Learning Machines, 3ª Ed., Prentice Hall, New Jersey, U.S.A. (2008).

Comunicações em Paineis

Using Waste Recycled PET for AC Production for Pesticides Removals from Aqueous Solutions.

I.P.P. Cansado, C. Galacho, A.S. Nunes, M.M.L. Ribeiro Carrott, P.J.M. Carrott

Centro de Química de Évora, Departamento de Química da Escola de Ciências e Tecnologia,

Universidade de Évora. Rua Romão Ramalho nº59, 7000-671 Évora - Portugal

ippc@uevora.pt

Over the last decades the literature has shown the possibility of producing activated carbons (AC) from a wide variety of raw materials and to use them as one of the most environment-friendly solutions for waste disposal. Additionally it has been shown that the adsorption of pollutants from different media by AC is one of the most efficient techniques for remediating or solving this type of problem [1]. In this context, the presence of pesticides in water can cause serious problems in the environment and to human health; their removal from wastewaters is a crucial concern. The work presented here focuses these two problematic areas (solid waste reduction and wastewater treatment). The main idea was to develop low cost and efficiently adsorbent materials for hazardous compounds removal from aquatic media, to level admitted in drinking water [2]. In this perspective, we present a study involving the production of AC, by chemical activation with KOH, from wastes PET (PET-2-700), the optimisation of the post modification treatment with urea (PET-2-700Ux) and their applicability for the adsorption of 4-chloro-2-methylphenoxyacetic acid (MCPA).

All AC were characterised in relation to their structural properties and chemical composition, by different techniques and the results were presented in a previous paper [1]. The kinetic and equilibrium studies of MCPA adsorption was defined as 72h at pH=3. The maximum adsorption capacity and the percentage removal was dependent on the initial concentration and for lower MCPA concentration the removal could reach 100%, allowing to achieve values acceptable in drinking water [2]. The higher MCPA adsorption capacity was obtained with the AC submitted to a post treatment with urea, however, the post modification conditions must be optimised in order to increase the pore volume and the MCPA adsorption at higher concentration. The present work revealed that original AC prepared from PET or after an adequate post treatment, are very promising adsorbents for MCPA and similar compounds removal of from aqueous medium, as these AC present already adsorption capacities higher than the commercial one used for this purpose [3].

References

- [1] I.P.P. Cansado, C. Galacho, A.S. Nunes, M.M.L. Ribeiro Carrott and P.J.M. Carrott, *Adsorption Science and Technology* - in Press.
- [2] Decreto-lei nº 306/2007, Diário da República Portuguesa, 1.ª série (164) (2007) 5747.
- [3] O. Gimeno, P. Plucinski and S.T. Kolaczowski. *Ind. Eng. Chem. Res.* 42 (2003) 1076.

Acknowledgements - This work was supported by the Fundação para a Ciência e a Tecnologia (Plurianual Finance Project Centro de Química de Évora (619)). The authors are also grateful to Selenis (Portugal) for the provision of the granulated recycled PET.

Adsorção/imobilização de fármacos e corantes em materiais mesoporosos ordenados do tipo SBA-15 e MCM-41

C. Galacho, M.M.L. Ribeiro Carrott, C. Carvalhal, N. Caixinha, P.A. Russo, P.J.M. Carrott

Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECT da Universidade de Évora

pcg@uevora.pt

38

Actualmente os fármacos e os produtos de cuidado pessoal, *PPCPs*, são considerados como uma classe emergente de contaminantes. A existência dos referidos compostos no meio ambiente, nomeadamente, em águas superficiais e subterrâneas, e em solos tem vindo a ser, desde do início dos anos 80, cada vez mais significativa. Tal deve-se, principalmente, ao uso crescente e generalizado dos fármacos para fins medicinais humanos e veterinários, e, à incapacidade dos mesmos serem completamente removidos nas estações de tratamento de efluentes.

Por outro lado, as rodaminas, corantes orgânicos da família das fluoronas com propriedades luminescentes, são compostos com ampla utilização em diferentes áreas. Quando presentes nos efluentes representam outra classe perigosa de poluentes aquáticos devido, fundamentalmente, à sua elevada solubilidade e baixa biodegradabilidade em água^[2].

Assim a remoção das classes de compostos anteriormente referidas, de sistemas aquáticos, constitui um assunto de relevância científica.

Adicionalmente as rodaminas podem sofrer auto-agregação em soluções o que leva a um decréscimo da fluorescência. As propriedades únicas dos materiais mesoporosos ordenados como as elevadas áreas superficiais proporcionadas pela rede mesoporosa regular podem promover a dispersão e isolamento das espécies individuais, permitindo evitar esse fenómeno desfavorável.

O trabalho apresentado foca o estudo da influência das propriedades de materiais mesoporosos ordenados, do tipo SBA-15 e MCM-41, assim como, das condições operacionais do meio, no processo de adsorção/imobilização de naproxeno (anti-inflamatório não esteroíde), norfloxacin (antibiótico) e rodamina 6B.

Os resultados preliminares obtidos demonstraram boas potencialidades de utilização dos materiais em estudo. Por exemplo, para o anti-inflamatório não esteroíde, demonstraram que um valor de pH do meio aproximadamente igual a 6 potencializa a remoção do fármaco em estudo. Adicionalmente, verificou-se uma maior eficiência de remoção dos vários compostos por parte dos materiais ordenados exclusivamente mesoporosos e que a mesma depende da razão molar de síntese Si/M dos materiais, onde M = Al ou Ti.

Agradecimentos. Os autores agradecem à Fundação para a Ciência e Tecnologia (FCT, Portugal) e ao FEDER pelo suporte financeiro (Projecto nº PTDC/CTM/67314/2006).

Application of Activated Carbons Modified with NaOH at High Temperature for Phenolic Compounds Removal

I.P.P. Cansado, P.A.M. Mourão, A.I. Falcão, M.M.L. Ribeiro Carrott, P.J.M. Carrott

Centro de Química de Évora, Departamento de Química da Escola de Ciências e Tecnologia,
Universidade de Évora. Rua Romão Ramalho nº59, 7000-671 Évora - Portugal

ippc@uevora.pt

39

During the last decade an increasing interest was expressed for grading the environment and the biomass. In this field, the preparation of activated carbons (AC) from waste PET and cork as precursors is of actual interest. In other respects, the preparation of AC modified by increasing its basic character gave rise to our group studies aiming at the development of competitive adsorbents with applications in different fields. It was reported in the literature, that AC presenting a basic character show a higher adsorption capacity for phenolic compounds from liquid media [1].

The AC were produced by activation with KOH from waste cork or from recycled PET. The initial AC and an activated carbon cloth were treated in a 1 mol/dm³ NaOH solution, at high temperature. The samples obtained from cork, PET and AC cloth were designated respectively by C-Na, P-Na and TC-Na.

All AC were characterised by N₂ adsorption at 77 K in order to obtain their textural properties and the isotherms are shown in Fig 1. Concerning the post treatment with NaOH, no significant effect was detected even concerning the pore size dimension or the pore volume with TC-Na. With P-Na, a pore volume reduction was noticed but with C-Na a significant increase in the pore volume was obvious. As expected and based on the previous results,

the AC modification with NaOH allowed us to increase the phenolic compounds removal (results not show here).

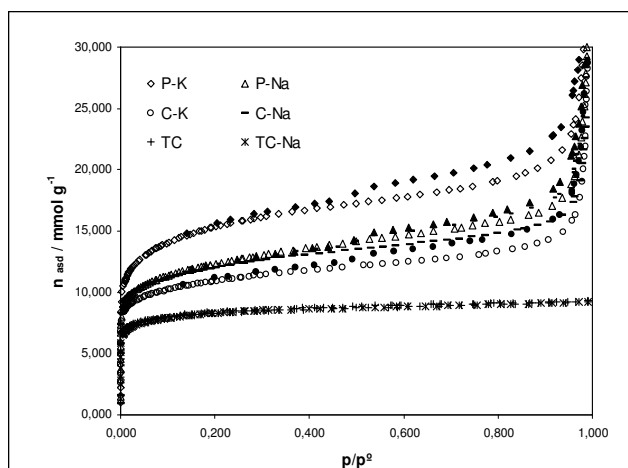


Fig.1- N₂ adsorption isotherms obtained on the initial AC, and after a basic post modification treatment.

References

[1] G.G. Stavropoulos, P. Samaras and G.P. Sakellariopoulos, Journal of Hazardous Materials, 151 (2008) 414.

Acknowledgements

This work was supported by the Fundação para a Ciência e a Tecnologia (Plurianual Finance Project Centro de Química de Évora (619)). The authors are also grateful to Selenis (Portugal) for the provision of the granulated recycled PET.

APPLICATION OF PRE-ADSORPTION AND DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT), FOR CHARACTERISATION OF THE POROSITY OF AEROGELS

P.J.M. Carrott, L.M. Marques, M.M.L. Ribeiro Carrott

Centro de Química de Évora and Departamento de Química, Universidade de Évora
peter@uevora.pt

40

A carbon aerogel is a form of porous carbon obtained by carbonisation or activation of a polymer aerogel which is prepared by a sol-gel route followed by supercritical drying. This procedure results in products with monolithic form and high mesopore surface area, which makes them interesting materials for use in a wide variety of applications which include, supercapacitors, hydrocarbon vapour recovery and carbon capture[1]. Furthermore, the introduction of metals opens up the possibility of their use in various catalytic processes [2, 3]. In addition to the mesoporosity, carbon aerogels also contain microporosity.

Polymer aerogels were prepared from 2,4-dihydroxybenzoic acid (DHBA) and formaldehyde (F) under basic conditions using a procedure based on that given in [2]. Carbon aerogels were obtained using a vertical tube furnace by heating individual monoliths.

The N_2 isotherms determined on all DHBA/F polymer and carbon aerogels were found to be Type IV of the IUPAC classification. The results show that increasing solids content lowered the mesopore volumes and diameters of the polymer aerogels. In the presence of metals, new mesoporosity was formed and there was an overall increase in mesopore volume and the appearance of a second peak on the mesopore size distribution. The n-nonane pre-adsorption method was successfully applied to characterise the microporosity and lead to values in the range $0.15\text{-}0.27\text{cm}^3\text{g}^{-1}$ and $0.47\text{-}0.65\text{nm}$ for the micropore volume and width, respectively. For metal free samples, excellent agreement is given by application of the quenched solid density functional theory (QSDFT) method. In the presence of metals both QSDFT and NLDFT give higher micropore volumes.

Acknowledgements: The work was funded by the Fundação para a Ciência e a Tecnologia (PhD grant SFRH/BD/19681/2004 and project PTDC/EQU-EQU/64842/2006) with national and European community (FEDER) funds.

References:

- [1] J. Fricke, R. Petricevic in: F. Schüth, K.S.W. Sing, J. Weitkamp (Eds.), Handbook of Porous Solids, Wiley-VCH, Weinheim, 2002. pp. 2037-2062
- [2] L.M. Marques, F.L. Conceição, M.M.L.R. Carrott, P.J.M. Carrott, Fuel Proc. Technol. 92 (2011) 229-233
- [3] P.J.M. Carrott, L.M. Marques, M.M.L. Ribeiro Carrott, Microporous and Mesoporous Materials 131 (2010) 75-81.

Adsorção de paracetamol por carvões activados

S. Pinheiro, C. Galacho, J.M. Valente Nabais, C. Laginhas, M.M.L. Ribeiro Carrott, P.J.M. Carrott

Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECT da Universidade de Évora
pcg@uevora.pt

A existência de produtos farmacêuticos no meio ambiente, nomeadamente, em águas superficiais e subterrâneas, e em solos, tem vindo a ser detectada desde o início dos anos 80 do século passado. Actualmente, e devido ao potencial impacto negativo no meio ambiente e na saúde pública, os fármacos são considerados como uma classe emergente de poluentes.

O trabalho apresentado tem como finalidade o estudo de adsorção do paracetamol por recurso a diferentes tipos de carvões activados produzidos a partir de pasta de papel, esparto e videira. Os ensaios foram realizados em solução aquosa e em dois tipos de fluidos simulados: gástrico e intestinal. Como técnica de análise foi usada a espectroscopia de UV/Vis.

Refira-se que o paracetamol (ou acetaminofeno) é a substância activa de vários medicamentos antipiréticos e analgésicos que mais se vendem em Portugal sem receita médica.

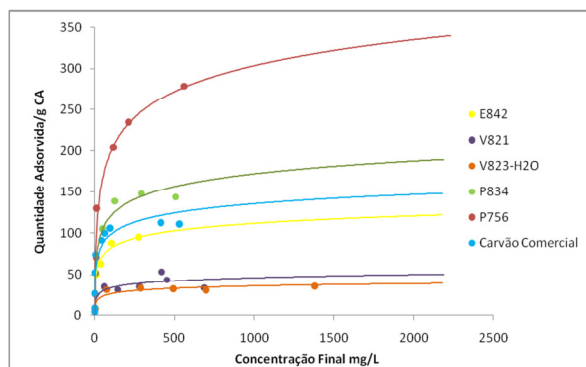


Fig 1: Isotérmicas de adsorção do Paracetamol em solução aquosa (P-papel; V-videira, E-esparto; 7-700°C e 8-800°C)

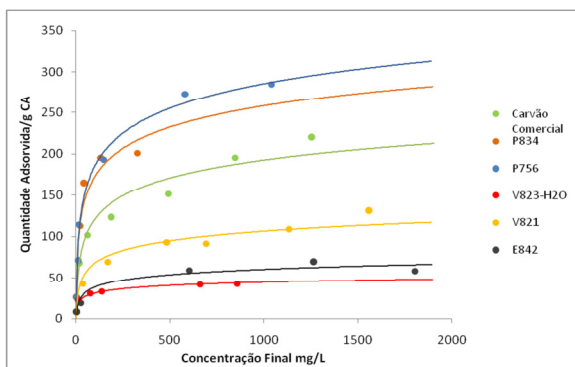


Fig 2: Isotérmicas de adsorção do Paracetamol em fluido gástrico (P-papel; V-videira, E-esparto; 7- 700°C e 8- 800°C)

Os resultados demonstraram que os melhores carvões para efectuar a remoção de paracetamol em meio aquoso são os obtidos a partir do papel (P756 e P834), com uma capacidade de adsorção de aproximadamente 280mg/g e 140mg/g, respectivamente. No que diz respeito à adsorção em fluido gástrico simulado verificou-se que a remoção máxima é conseguida no carvão obtido a partir da pasta de papel e no carvão comercial apresentando, respectivamente, capacidades de adsorção de 290mg/g e 250mg/g.

Agradecimentos. Os autores agradecem à FCT, COMPETE, QREN e União Europeia (FEDER) pelo financiamento através do projecto FCOMP-01-0124-FEDER-007142.

Adsorção de metformina por carvões activados

A. Galego, J.M. Valente Nabais, C. Galacho, C. Laginhas, M.M.L. Ribeiro Carrott, P.J.M. Carrott

Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECT da Universidade de Évora
jvn@uevora.pt

42

A diabetes está em crescimento acentuado na população mundial sendo de particular relevo a diabetes do tipo 2. Este crescimento leva a um aumento do consumo dos anti-diabéticos orais, sendo a metformina um dos princípios activos mais usados para este fim.

Actualmente existe alguma preocupação em relação às overdoses provocadas por este tipo de medicamentos e, adicionalmente, o seu elevado consumo provoca um aumento nos despejos de medicamentos no lixo doméstico tornando-se, assim, um grave problema de poluição ambiental e de impacto na saúde pública.

Neste trabalho estudou-se a utilização carvões activados para a remoção de metformina de soluções aquosas e em fluidos biológicos simulados (gástrico e intestinal), no sentido de avaliar a sua capacidade para a despoluição de águas e no tratamento de overdoses. Nos ensaios adsorção foram utilizados 5 tipos de carvões activados: carvão comercial, DCL, e carvões preparados laboratorialmente a partir de videira, endocarpo de café, pasta de papel e esparto, respectivamente, amostras V739, Cf840; P827 e E853.

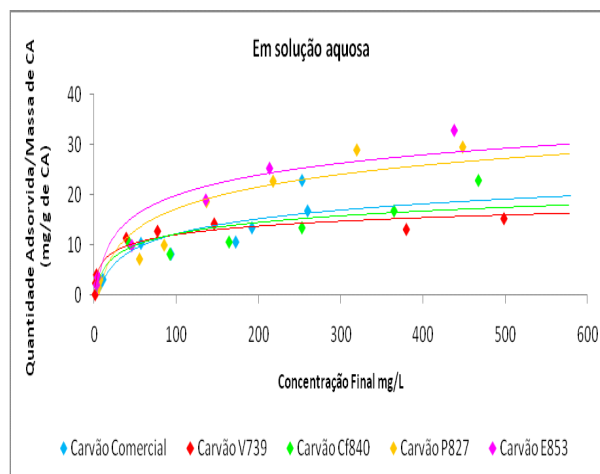


Figura 1-Gráfico representativo das isotérmicas de adsorção de metformina, obtidas em solução aquosa para os diferentes tipos de carvões activados.

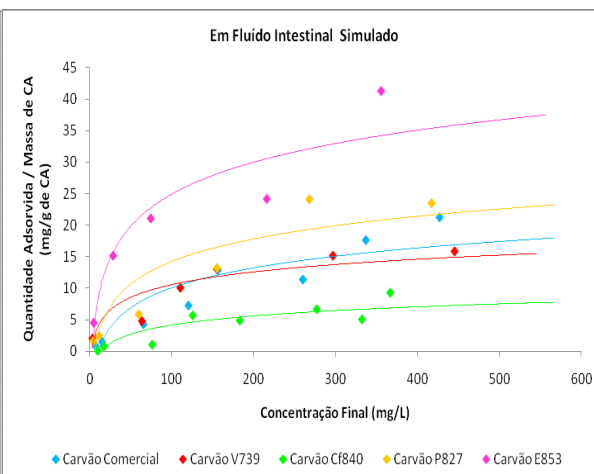


Figura 2-Gráfico representativo das isotérmicas de adsorção de metformina, obtidas em fluido intestinal simulado para os diferentes tipos de carvões activados.

Os resultados obtidos demonstraram que os melhores carvões para a remoção da metformina são E853 e P827, com uma capacidade máxima de adsorção de 30mg/g e 27,5 mg/g em solução aquosa e 37,5 mg/g e 23,5 mg/g no fluido intestinal simulado.

Agradecimentos. Os autores agradecem à FCT, COMPETE, QREN e União Europeia (FEDER) pelo financiamento através do projecto FCOMP-01-0124-FEDER-007142.

Influence of hydrocarbonization conditions on the porosity of derived carbon dioxide activated carbons

S. Román^{1*}, B. Ledesma², J.V. Nabais³, C. Laginhas³

¹*Departamento de Física Aplicada de la Universidad de Extremadura,*

²*Departamento de Ingeniería Química y Energética de la Universidad de Extremadura,*

³*Departamento de Química da Universidade de Évora*

sroman@unex.es

The production of Activated Carbons (ACs) involves a way to provide an added value to biomass resources. These materials have traditionally been prepared from physical or chemical activation processes (AP), which show some drawbacks such as the use of a great amount of energy supply, or the generation of contaminated water, respectively.

In this sense, hydrothermal carbonization (HC) of biomass has been recently proposed as an interesting way to produce various carbon-based materials. Regarding the production of porous solids by HC, most of the results found in the bibliography show that the porosity of hydrochars is scarce, probably due to pore blockage by carbon products from decarboxilation reactions, as well as to the polymerization of new structures which tend to be placed on the HC surface. In the same way that AP allow the selective removal of carbon atoms and thus the development of porosity in chars made by conventional pyrolysis; we studied the feasibility of producing ACs by carbon dioxide activation of hydrochars produced from walnut shells. Thus, the influence of HC operating parameters (temperature, time and ratio biomass/water) was related to the characteristics of hydrochars and derived-ACs.

HC processes were carried out in a conventional stainless steel autoclave with a capacity of 150 ml (Berghof, Germany). Walnut shell (5 g, Ø of 1-2 mm) was added to a variable amount of deionized water. After keeping the mixture under stirring for 2 h, it was placed on the autoclave and was heated at the prescribed temperature (190-220 °C) during the defined holding time (10-90 h). Then, the resulting hydrochars were activated with CO₂ at 800-850°C during 30 min (the high reactivity of the precursor did not allow the use of greater periods of time). The ACs porosity characteristics were studied by N₂ adsorption at 77 K (Autosorb, Quantachrome) and SEM micrography (Hitachi S-3600N).

The results obtained indicate that walnut shell HC show a low porosity, which can be markedly developed by CO₂ activation. Also, although the use of greater HC time and temperature did not have any apparent effect on the HC textural characteristics, it showed a positive influence on the porosity derived-ACs.

Agradecimentos. The authors are thankful to FCT (Portugal), COMPETE, QREN and EU (European Regional Development Fund, FEDER) for financial support through Project FCOMP-01-0124-FEDER-007142 and to the Junta de Extremadura/Universidad de Extremadura for the project associated to Programa Propio-Acción VII.

Adsorption of Bovine Serum Albumin onto Mesocellular Foams: Effect of pore size and surface chemistry

F. Sezões, P.A. Russo, M.M.L. Ribeiro Carrott, P.A.M. Mourão, P.J.M. Carrott

Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE

manrc@uevora.pt

44

Several attractive features of ordered mesoporous materials (OMM), such as high surface areas, large mesopore volumes, well-defined pore-size distributions and particularly the possibility of tuning the geometry and pore size to a target dimension, make them ideal for hosting molecules of various sizes and shapes. Amongst the numerous types of OMM currently being developed, those with wider mesopores which are able to accommodate large biomolecules have potential applications in domains of separation, as biosensors and as drug-delivery systems. The present work contributes to this field through the study of the adsorption of *Bovine Serum Albumin* (BSA, a large globular protein widely used in many studies due to its interest as a model for *Human Serum Albumin*) on mesocellular foam (MCF) materials. The quantitative adsorption equilibrium and kinetics of BSA was carried out on pure silica MCF with differently sized cells and windows [1] and on an MCF functionalised with groups of different size, nature and content in order to obtain surfaces with a wide range of characteristics, such as hydrophobicity, steric hindrance or polarity. The results showed that adsorption onto an MCF possessing a window size of 11.3 nm was mostly restricted to the external surface, while a considerable increase in the maximum adsorption capacity from 120 mg/g to 500–600 mg/g was observed when the window size was above the critical dimension of 13.9 nm. The maximum adsorption capacities could be related to the pore volume rather than to the total surface area. The confined BSA molecules were strongly immobilised in the cells since only a small proportion was desorbed at pH 7 from the material with windows of 17.3 nm dimensions. The large mesopore size and volume of the MCF enabled modification to be achieved without significantly disrupting its structural features. The adsorption was found to further increase by ~14% by functionalisation with a certain amount of aminopropyl groups. BSA showed more affinity for the solids containing small amounts of chloromethyl and mercaptopropyl groups than for the pristine silica, which was revealed by higher total amounts adsorbed per unit of mesopore volume.

[1] F. Sezões, M.M.L. Ribeiro Carrott, P.A.M. Mourão & P. J.M. Carrott, *Adsorpt. Sci. Technol.* 28 (2010) 777-788.

Acknowledgments. This work was financially supported by FEDER funds through the Programa Operacional Factores de Competitividade – COMPETE & by National funds through FCT – Fundação para a Ciência e a Tecnologia under project FCOMP-01-0124-FEDER-007145.

To Wash or Not to Wash: That's the Question

J.M. Valente Nabais, C. Laginhas, P.J.M. Carrott, M.M.L. Ribeiro Carrott
 Centro de Química de Évora and Departamento de Química, Universidade de Évora,
 Rua Romão Ramalho nº 59, 7000 – 671 Évora, Portugal.
 carloslaginhas@gmail.com

45

The preparation of activated carbons (AC) from lignocellulosic precursors by the so-called physical activation involves several very well known steps, such as, preparation of the precursor (when needed), carbonization under inert atmosphere and activation with an activating gas (carbon dioxide, steam,...). If chemical activation is used the general procedure involves the impregnation of the precursor with the activating agent (H_3PO_4 , KOH , NaOH ,...), the pyrolysis under an inert atmosphere and a final washing step to remove the excess of the chemical used as activating agent. When the last method is used the final washing step is unquestionable needed and always executed. However, when physical activation is used one question arises in our mind: Should the final activated carbon be washed with water? Does it make any difference?

In this work we report the effect of washing the samples after activation in order to ring some light into this question.

The ACs were characterised by adsorption of N_2 at 77K, FTIR, Elemental analysis of carbon, hydrogen, sulphur and nitrogen and point of zero charge.

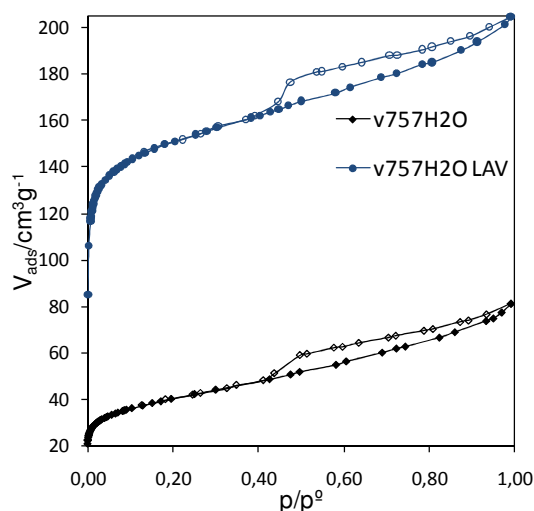


Figure 1 – Representative adsorption isotherms before (v757H2O) and after (v757H2O LAV) washing the sample (vineshoot, steam

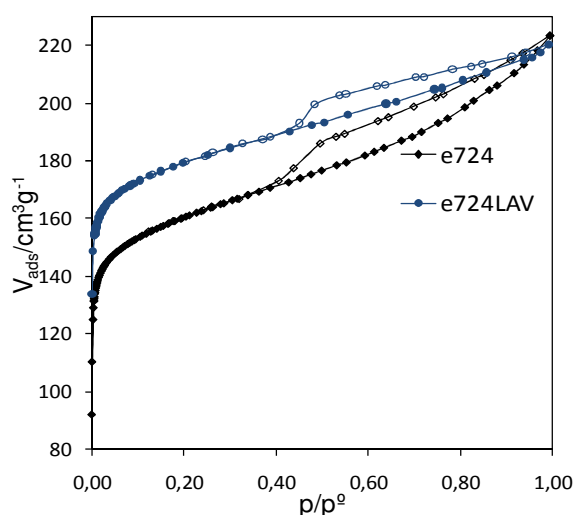


Figure 1 – Representative adsorption isotherms before (e724) and after (e724 LAV) washing the sample (esparto grass, CO_2 activation)

Agradecimentos

The authors are grateful to the FCT (Portugal) and the European Regional Development Fund (FEDER) for financial support (Project FCOMP-01-0124-FEDER-007142).

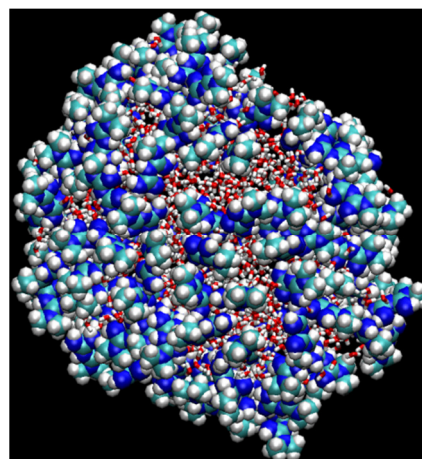
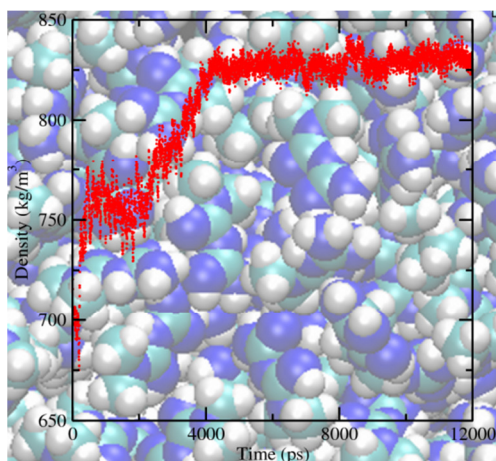
Characterization of metformin/functional groups associates in aqueous system

C. Herdes, J.M.V. Nabais

*Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECT da Universidade de Évora**Rua Romão Ramalho, nº 59, 7000 - 671 Évora**cherdes@uevora.pt*

46

In this contribution we present a fundamental study of metformin (*N,N*-dimethylimidodicarbonimidic diamide) aqueous mixtures, with three different functional groups, specifically, acetic acid, ethanol and DABCO (1,4-diazabicyclo[2.2.2]octane). The chemical equilibrium and thermodynamic parameters were determined by molecular dynamics in the NpT and NVT ensembles at standard conditions using GROMACS [1]. All the molecular models were TraPPE-like built [2]. The outcomes of this study, particularly, the prediction of the free energy of binding for metformin/functional group and the insights on the solvent effect over this parameter will help the designing process of novel functionalized activated carbon for metformin recovery from water [3].



Left) Calculated metformin density 828.594 (7.26695) kg/m³ at 25 °C and 1 atm. Right) Water metformin micelle same conditions.

[1] Lindahl, E.; Hess, B.; van der Spoel, D. J. Mol. Model. 2001, 7, 306.

[2] Sokkalingam, N.; Kamath, G.; Coscione, M.; Potoff, J.J. J. Phys. Chem. B 2009, 113, 10292.

[3] AL-Bayati, R. A. European Journal of Scientific Research ISSN 1450-216X Vol.40 No.4 (2010), pp.580-588

Propriedades de SONLO de complexos organometálicos de Ni e Fe com vista à possibilidade de comutação molecular

Ana M. Santos^{1,2}, Paulo J. Mendes², Tiago J. L. Silva^{1,2}, M. H. Garcia¹, M. P.

Robalo³

¹*Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE, Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho 59 7000-671 Évora*

²*Centro de Ciências Materiais e Moleculares, Departamento de Química e Bioquímica, Universidade de Lisboa, Campo Grande 1796-016 Lisboa*

³*Centro de estudos de Engenharia Química, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1, 1959-007 Lisboa
margaridaggs@gmail.com*

47

O desenvolvimento de compostos, orgânicos e organometálicos com propriedades ópticas não lineares de 2ª ordem (SONLO), tem grande interesse em consequência das suas potenciais aplicações em dispositivos ópticos no domínio das comunicações, computação e armazenamento de dados.^[1] O conceito de comutação molecular (*molecular switching*) em SONLO, consiste em alternar entre várias formas moleculares obtendo por consequência diferentes respostas na magnitude da primeira hiperpolarizabilidade. Uma das formas de obter diferentes respostas da hiperpolarizabilidade é alterar os estados de oxidação da molécula.^[2]

Os monociclopentadienilos de ferro(II) e níquel(II) aqui apresentados foram caracterizados por métodos espectroscópicos e electroquímicos. As propriedades moleculares de NLO foram calculadas usando a teoria do funcional da densidade (DFT) e avaliadas experimentalmente em solução pela técnica de dispersão Hyper Rayleigh. As técnicas electroquímicas pretenderam demonstrar a viabilidade da utilização destes compostos como comutadores moleculares. Os compostos de ferro apresentam resultados de reversibilidade dos processos redox indicativos de uma possível utilização em aplicações como comutadores moleculares.

[1] Goovaerts, E; Wenseleers W.; Garcia, M.H.; Cross G.H. Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials, Ed. H.S. Nalwa, 2001, 9, 127.

[2] Asselberghs, I.; Clays, K.; Persoons, A; Ward M.; McCleverty, J. J. Mater. Chem. 2004, 14, 2831.

Agradecimentos. Os autores agradecem à FCT por financiamento do projecto FCOMP-01-0124-FEDER-007433.

Compostos Organometálicos contendo Anéis Aromáticos Heterocíclicos: Determinação das suas propriedades de Óptica Não Linear

Paulo J.G. Mendes¹, Tiago J.L. Silva^{1,2}, M. Helena Garcia²

¹*Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE, Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho 59 7000-671 Évora*

²*Centro de Ciências Materiais e Moleculares, Departamento de Química e Bioquímica, Universidade de Lisboa, Campo Grande 1796-016 Lisboa*
pjgm@uevora.pt

A síntese de novos compostos heterocíclicos aromáticos incorporados em sistemas organometálicos tem sido um tópico abrangente em química, em particular em química de materiais uma vez que quer o centro metálico quer o ligando em si apresentam propriedades redox que permitem a sua utilização como condutores moleculares, sensores químicos, sondas fluorescentes, etc.. Sistemas contendo enxofre são muito usados em nanoelectrónica, onde são diversos exemplos de polímeros condutores que possuem anéis de tiofeno ou derivados deste.^[1] Dado que, estruturalmente, estes compostos são adequados para aplicações em fotónica, o trabalho aqui apresentado pretende mostrar a aplicação de compostos heterocíclicos aromáticos baseados em tiofenos que, em conjugação com fragmentos organometálicos, possuem aplicações em Óptica Não-linear (NLO), nomeadamente nos processos de 2ª ordem.^[2] Foram sintetizados diversas famílias contendo diferentes tamanhos nos sistemas conjugados e diferentes grupos aceitadores electrónicos terminais.

Os resultados mostram que as famílias estudadas possuem óptimas propriedades de NLO, nomeadamente elevados valores de hiperpolarizabilidades de segunda ordem (β). Estas propriedades foram correlacionadas com dados espectroscópicos e electroquímicos para que mais tarde se possa criar um modelo que permita prever *à priori* a magnitude dos valores das hiperpolarizabilidades de moléculas estruturalmente semelhantes.

[1] – Heinze, J., Frontana-Urbe, B., Ludwigs, S. Chem. Rev. 2010, 110, 4724–4771
4-2471, 1999

[2] – Garcia et al., Journ. Organomet. Chem., 2009, 694, 433-445; Garcia et al., Journ. Organomet. Chem., 2009, 694, 2888-2897

Agradecimentos. Os autores agradecem à FCT por financiamento do projecto FCOMP-01-0124-FEDER-007433. O autor Tiago Silva agradece ainda a Bolsa de doutoramento concedida.

Síntese e estudo de compostos organometálicos/coordenação para as tecnologias da optoelectrónica e fotónica

Célia Serrano¹, Paulo J. Mendes²

¹Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho 59 7000-671 Évora

²Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE, Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho 59 7000-671 Évora
cs-celia_serrano@hotmail.com

49

Devido às suas potenciais aplicações como nano-componentes na área do processamento digital e comunicações, os compostos organometálicos que possuem propriedades ópticas não lineares de 2ª ordem tem sido muito investigados [1]. Compostos de η^5 -monociclopentadienilo metálicos, contendo vários cromóforos derivados de benzenos e tiofeno tem vindo a ser objecto de estudo dentro desta área. Cálculos quânticos usando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT), em particular métodos Time-Dependent (TD) tem sido usados para perceber os factores electrónicos responsáveis pelos fenómenos ópticos não lineares a nível molecular, nomeadamente em derivados de η^5 -monociclopentadienilo metálicos [2,3].

Neste trabalho estudaram-se os complexos-modelo [η^5 -CpNi(PH₃)(CC{SC₄H₂}_nY)], [η^5 -CpFe(H₂PC₂H₄PH₂)(CC{SC₄H₂}_nY)] e [η^5 -CpRu(H₂PC₂H₄PH₂)(CC{SC₄H₂}_nY)] (Y=CN, CHO, NO₂ ou C=C(CN)₂) por cálculos quânticos de DFT/TD-DFT. Os resultados dos cálculos teóricos por DFT foram usados no sentido de tentar prever os comportamentos dos complexos no que se refere às propriedades ópticas não lineares de segunda ordem, em particular a primeira hiperpolarizabilidade, β . Sintetizaram-se ainda ligandos de tiofeno e complexos derivados das famílias anteriores para complementar o estudo. Os compostos sintetizados foram caracterizados espectroscopicamente por I.V., RMN ¹H e UV-Visível. O presente trabalho foi realizado no período de uma Bolsa de Integração na Investigação (BII), no âmbito do projecto FCOMP-01-0124-FEDER-007433 (FCT PTDC/QUI/67362/2006).

[1] – Gooverts, E.; Garcia, M. H.; *Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials*, Academic Press. Cap. 3, 2001

[2] – Mendes, P.; Carvalho, A. J. P.; Ramalho, J. P.; *Journ. Mol. Struct. (THEOCHEM)*, 900 (2009) 110-117

[3] – Mendes, P.; Silva, T.J.L., Carvalho, A. J. P.; Ramalho, J. P.; *Journ. Mol. Struct. (THEOCHEM)*, 946 (2010) 33-42

Agradecimentos. Os autores agradecem à FCT por financiamento do projecto FCOMP-01-0124-FEDER-007433. A autora Célia Serrano agradece ainda a BII UE|CQE|BII6|2009 concedida.

Complexos Organometálicos de Ferro (II) e Ruténio (II) como comutadores moleculares: um estudo prático e computacional

Tiago J.L. Silva, Paulo J.G. Mendes, M. Helena Garcia

¹Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE, Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho 59 7000-671 Évora

²Centro de Ciências Materiais e Moleculares, Departamento de Química e Bioquímica, Universidade de Lisboa, Campo Grande 1796-016 Lisboa

tjlsilva@fc.ul.pt

50

A Óptica não-linear (NLO) é um ramo do conhecimento que trata da interação da matéria com feixes intensos de radiação, e onde podem ser obtidos novos feixes cujas propriedades serão diferentes das propriedades do feixe incidente.^[1] Tal alteração é conseguida através da utilização de materiais hiperpolarizáveis, onde se destacam os complexos organometálicos, em particular monociclopentadienilos de elementos dos primeiros períodos do grupo VIII. A comutação molecular (*molecular switching*) está relacionada com o processo pelo qual existe uma alteração de propriedades entre dois estados de uma molécula. Recentemente surgiu um novo conceito de comutação molecular, que tem por base a óptica não linear, através da alteração do valor da primeira hiperpolarizabilidade (β) entre uma forma “on” e uma forma “off”.^[2]

Este trabalho trata da síntese e caracterização espectroscópica e electroquímica de uma família de complexos de ferro (II) e ruténio (II) contendo como cromóforo com atividade em NLO um derivado de 1,3-ditienilisotonaftaleno. São apresentados também os valores das hiperpolarizabilidades (β), medidas por dispersão de Hyper Rayleigh em solução de clorofórmio. Estudos computacionais por DFT (Density Functional Theory) mostram também ser bastante úteis para deslindar os factores electrónicos por detrás das propriedades de NLO.^[3] Os nossos resultados mostram que os compostos sintetizados podem ser potencialmente utilizados como comutadores moleculares em sistemas de nanoelectrónica: quando sujeitos a processo redox para remoção ou adição de um electrão, os valores de β diferem de um factor de cerca de 175 vezes.

[1] – Gooverts, E.; Garcia, M. H.; *Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials*, Academic Press. Cap. 3, 2001

[2] – Coe, B.; *Chem. Eur. J.*, 5, 9, 2464-2471, 1999

[3] – Mendes, P.; Carvalho, A. J. P.; Ramalho, J. P.; *Journ. Mol. Struct. (THEOCHEM)*, 900, 110-117, 2009

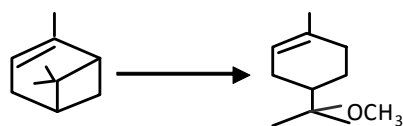
Agradecimentos. Os autores agradecem à FCT por financiamento do projecto FCOMP-01-0124-FEDER-007433. O autor Tiago Silva agradece ainda a Bolsa de doutoramento concedida.

Heteropoliácidos como catalisadores ácidos na metoxilação de α -pineno

D.S. Pito, J.E. Castanheiro

*Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE**jefc@uevora.pt*

Os monoterpenos são amplamente usados nas indústrias farmacêutica, cosmética e na indústria alimentar como componentes de drogas e ingredientes de aromas e fragrâncias artificiais [1,2]. A metoxilação de terpenos é uma via de síntese importante para a obtenção de éteres terpénicos, os quais têm muitas aplicações nas indústrias de perfumes e farmacêutica [1]. O produto principal da metoxilação do α -pineno é o α -terpinil metil éter.



Tradicionalmente, esta reacção é levada a cabo na presença de catalisadores homogéneos, tais como ácido sulfúrico. No entanto, os catalisadores homogéneos colocam sérios problemas ambientais, obrigando à sua

separação dos produtos da reacção e ao tratamento subsequente do efluente do processo. Estes problemas podem ser ultrapassados pelo uso de catalisadores sólidos ácidos. Os catalisadores heterogéneos permitem uma fácil separação da mistura reaccional, são regeneráveis/reutilizáveis e são benignos para o meio ambiente [3].

Os heteropoliácidos (HPA's) possuem características únicas que fazem com que estes sejam catalisadores economicamente e também ambientalmente mais atractivos do que os catalisadores convencionais. Estes catalisadores são complexos que possuem propriedades ácidas, pois são ácidos de Brönsted muito fortes, possuindo também propriedades catalíticas redox, permitindo oxidações sob condições suaves. Os HPAs, devido apresentarem uma área específica baixa, têm sido heterogeneizados em sílica, alumina, zeólitos, carvões activados [4].

Neste trabalho foi efectuado um estudo sobre a metoxilação de α -pineno na presença de ácido tungstofosfórico, silicotungstico e molibdofosfórico (PMo) imobilizados em sílica.

Os catalisadores foram preparados de acordo com o procedimento apresentado por Y. Izumi et al. [5].

[1] A. Corma, S. Iborra, A. Velty, Chem. Rev. 107 (2007) 2411.

[2] P. Mäki-Arvela, B. Holmbom, T. Salmi, D.Y. Murzin, Catal. Rev. 49 (2007) 197.

[3] J.L. Monteiro, C.O. Veloso, Top. Catal. 27 (2004) 169.

[4] I. Kozhevnikov, Chem. Rev., 98 (1998) 171.

[5] Y. Izumi, K. Hisano, T., Hida, App. Cat. A: Gen. 181 (1999), 277.

Evaluation of the Antioxidant Activity of New 3-Substituted Coumarin Derivatives by Cyclic Voltammetry

S. Martins¹, J. Teixeira^{1,2,3}, A. Pereira^{1,2}

¹Centro de Química de Évora, ²Departamento de Química da ECTUE, ³Laboratório HERCULES
jmgt@uevora.pt

52

Free radicals, species with one or more unpaired electrons are produced in normal or pathological cell metabolism, from xenobiotics, or through ionizing radiation. Electron acceptors such as molecular oxygen react easily with free radicals, to become radicals themselves. Oxygen free radicals or reactive oxygen species (ROS) such as superoxide anion radicals ($O_2^{\cdot-}$), hydrogen peroxide (H_2O_2), hydroxy radicals ($\cdot OH$), and singlet oxygen (1O_2) are continuously generated in cells exposed to an aerobic environment, and have been associated with the genesis of tumors as well as age-dependent diseases such as atherosclerosis, arthritis, and neurodegenerative disorders. In this context, the chemopreventive role of antioxidants present in consumable fruits, vegetables, and beverages has received considerable attention and has been a growing interest in finding novel antioxidants in order to meet the requirements of pharmaceutical industries^[1].

Several analytical methods have been used to evaluate the activity of antioxidant compounds, such as the cyclic voltammetry^[2] and the 1,1-diphenyl-2-picrylhydrazyl radical (DPPH) assay^[3].

In this work the antioxidant activity of three new synthetic coumarin derivatives, 3-chloro-6,7-dihydroxycoumarin, 3-bromo-6,7-dihydroxycoumarin and 6,7-dihydroxy-3-[(*E*)-2-phenylethenyl]coumarin, is evaluated by cyclic voltammetry. The anodic peak potentials were measured and compared to their antioxidant activities measured by the DPPH radical assay. The voltammetric experiments were carried out at pH 7.0 (phosphate buffer) in order to resemble the conditions of DPPH assays. Both voltammetric and DPPH assay data were compared with data obtained for 6,7-di-hydroxycoumarin and quercetin, with high antioxidant activity. The structure–activity relationships of the synthesized coumarins as potential antioxidants was investigated in order to understand how the different 3-substitutions affect the antioxidant activity of the 6,7-dihydroxycoumarin.

[1] S. Lee, Z. Mbawambo, Chung, L. Luyengi, E. Gamez, R. Mehta, A. Kinghorn, J. Pezzuto, *Combinatorial Chemistry & High Throughput Screening* 1 (1998) 35.

[2] S. Chevion, M. Roberts, M. Chevion, *Free Radic. Biol. Med.* 28 (2000) 860.

[3] Molyneux, P., Songklanakarin J. Sci. Technol., 2004, 26, 211.

Acknowledgments. The authors thank Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT) for financial support (Project FCOMP-01-0124-FEDER-007448).

Nova Metodologia para a Síntese de 3-Etenil Coumarinas através de Reacções de Heck

S.M. Martins¹, P. C. Branco², A.M. Pereira¹

²*Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE.*

²*REQUIMTE, Departamento de Química, FCT, UNL, Lisboa.*

amlp@uevora.pt

As coumarinas constituem uma das mais importantes classes de materiais orgânicos fluorescentes e têm um papel vital nos dispositivos electroluminescentes e de electropolarografia. Os derivados das coumarinas têm vindo a tornar-se num dos grupos de materiais orgânicos fluorescentes mais investigados e com crescente importância comercial.^[1,2]

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.^[1,3]

De acordo com estes pressupostos desenvolveu-se uma nova metodologia para a síntese de novos derivados de 3-etenil coumarinas, através da reacção de Heck, com significativos rendimentos reaccionais.

A aplicação desta metodologia permitiu o isolamento e a caracterização de diversos derivados de 3-etenil coumarinas, nomeadamente a 3-etenil-6,7-dimetoxicoumarina, a 6,7-dimetoxi-[3-(*E*)-2'-feniletetil]coumarina, a 6,7-dimetoxi-[3-(*E*)-2'-(4'-nitrofenil)etenil]coumarina, a 6,7-dimetoxi-[3-(*E*)-2'-(4'-metoxifenil)etenil]coumarina e o 4-[2-(*E*)-(6,7-di-metoxi-coumarin-3-il)etenil]benzaldeído.

A deslocalização do sistema de electrões π conjugados, induzida pelos diversos substituintes das coumarinas, foi igualmente avaliada através da espectroscopia de UV/Vis.

[1] Schiedel, M.; Briehn, C.; Bäuerle, P., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2001**, 40, 4677-4680.

[2] Wilze, K.; Johnson, A. *Handbook of Detergents, Chemistry, Production, and Application of Fluorescent Whitening Agents, Part F: Production*; CRC Press, Taylor & Francis: Boca Raton, **2007**.

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

Agradecimentos. Fundação para a Ciência e Tecnologia pelo financiamento do Projecto FCOMP-01-0124-FEDER-007448 e da Bolsa de Investigação Científica do Mestre Sérgio Martins.

Molecular dynamics simulations of Palmitoylsphingomyelin and Cholesterol bilayer models in a So phase

P.D. Santos¹, A.M.T. M. Canto², A.J.P. Carvalho³

¹Centro de Química de Évora, ²Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE,

³Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE

oreo_bolaxas@hotmail.com

54

Sphingomyelin, one of the main lipid components of biological membranes, is enriched within lipid microdomains of the cell membrane termed lipid rafts. These play a part in regulating a variety of cellular events such as protein trafficking and signal transduction. In particular, specific lateral domains enriched in sphingomyelin and cholesterol have been proposed to play an important functional role in biomembranes, although their precise characteristics have remained unclear. A detailed knowledge of the behavior of these systems is required to thoroughly understand the functional role of membranes. We have carried out an atomic-level molecular dynamics simulation of Palmitoylsphingomyelin bilayers with 5% cholesterol and without cholesterol at a temperature of 300 K. At this temperature the bilayers are in a solid ordered phase (SO). Parameters such as area per lipid, membrane thickness, number of contacts and order parameters were assessed. Our results show little change in those parameters with the presence of such a low cholesterol concentration which concurs with previously experimental reports¹.

[1] R.F.M. de Almeida, A. Fedorov, M. Prieto, Sphingomyelin/phosphatidylcholine/cholesterol phase diagram: Boundaries and composition of lipid rafts, *Biophys J*, 85 (2003) 2406-2416.

Solubilidades de xénon em hidrocarbonetos por simulação molecularL.F.G. Martins¹, A. J. P. Carvalho¹, J.P.P. Ramalho¹, E.J.M. Filipe²¹Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE, Évora, ²Centro de Química Estrutural do IST, Lisboa
lfgm@uevora.pt

O trabalho apresentado surgiu da necessidade de modelar teoricamente o processo de solubilização de gases nobres em alcanos e cicloalcanos, usando ferramentas teóricas simples e expeditas. Bonifácio *et. al.*^{1,2} mediram solubilidades (expressas pela constante de Henry) de xénon em *n*-pentano, *n*-hexano e ciclopentano, alargando a gama de temperatura coberta pelas medidas, em relação aos anteriores trabalhos de Pollack *et. al.*^{3,4}. A quantidade e precisão dos resultados de Bonifácio *et. al.* permitiram o cálculo da entalpia de solvatação em função da temperatura, bem como a correspondente entalpia de interacção. Para ambos os alcanos lineares, a entalpia de interacção de xénon com o solvente apresenta um máximo em função da temperatura. Quando representada em função da temperatura reduzida, o valor de T_r para o máximo da curva é muito semelhante para os dois solventes e muito próximo da temperatura reduzida à qual a entalpia de excesso para a mistura equimolar em sistemas do tipo xénon/alcano passa por zero. Tal significa que o estudo de solubilidades de xénon em alcanos constitui um teste à existência de comportamentos universais em misturas líquidas. Por outro lado, os resultados das medidas usando ciclopentano como solvente são substancialmente diferentes dos do sistema envolvendo o seu congénere linear: a entalpia de solvatação aumenta com o aumento da temperatura, produzindo um C_p de solvatação positivo, ao invés do que se passa com a dissolução de xénon em *n*-pentano e *n*-hexano.

Com o objectivo de modelar este tipo de sistemas, bem como descrever e interpretar os fenómenos moleculares por detrás dos comportamentos observados, demos início a um estudo sistemático de previsão de solubilidades de xénon em alcanos e cicloalcanos em função da temperatura e do tamanho da cadeia do solvente por simulação molecular. Deste modo, determinaram-se constantes de Henry em função da temperatura para o processo de dissolução de xénon em alcanos lineares (de *n*-pentano a *n*-nonano) bem como cicloalcanos, como ciclopentano e ciclohexano (este último ainda a decorrer). As simulações foram levadas a cabo usando o método de Monte Carlo, sendo as moléculas modeladas por campos de forças muito simples: TraPPE-UA⁵ para os alcanos e cicloalcanos e Lennard-Jones simples para o xénon⁶.

O estudo apresentado demonstra que o modelo usado prevê quantitativamente as solubilidades de xénon em alcanos e cicloalcanos e confirma as tendências observadas neste tipo de sistemas, no que concerne à dependência da temperatura das grandezas derivadas (entalpia de solvatação e interacção). O cálculo de funções de distribuição radial permite obter afirmação adicional sobre a forma como a estrutura do líquido influencia as propriedades termodinâmicas observadas.

[1] R.P.M.F. Bonifácio, L.F.G. Martins, C. McCabe, E.J.M. Filipe, *J. Phys. Chem. B*, 114 (2010), 15897–15904[2] R.P.M.F. Bonifácio, E.F.M. Filipe, M.C. dos Ramos, F.J. Blas, L.F.G. Martins, *Fluid Phase Equilibria*, 303 (2011) 193-200[3] G. L. Pollack, J. F. Himm, *J. Chem. Phys.*, 77 (1982), 3221–3229[4] G.L. Pollack, R.P. Kennan, J.F. Himm, P.W. Carr, *J. Chem. Phys.*, 90 (1989), 6569–6579[5] M.G. Martin, J.I. Siepmann, *J. Phys. Chem. B*, 102 (1998) 2569[6] M. Bohn, S. Lago, J. Fischer, F. Kohler, *Fluid Phase Equilibria*, 23 (1985) 137**Agradecimentos** FCT (Projecto POCTI/QUI/46299/2002) e Centro de Geofísica de Évora (Centro de Cálculo)

Theoretical study of azobenzene adsorption on the rutile TiO₂ (110) surface: the role of van der Waals interactions

J.P. Prates Ramalho¹, F. Illas²

¹Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE, ²Departament de Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional (IQTUB), Universitat de Barcelona, C/Martí i Franquès 1, 08028 Barcelona, Spain
jpcar@uevora.pt

In the past few years azobenzene interacting with different surfaces has received considerable attention from both experimental and theoretical points of view due to its capabilities as a molecular switch. Li and Diebold [1] found that a rutile TiO₂(110) crystalline surface has the capability of breaking the rather strong NN double bond of adsorbed azobenzene leading to phenyl imide fragments organized in an ordered superstructure. In addition, the experiments show that the interaction of azobenzene with the TiO₂ surface is complex and strongly depending on the coverage. Thus, at low coverage intact adsorbed azobenzene in a *trans* configuration is observed although as a rather mobile species whereas at full coverage the molecule dissociates. Li and Diebold suggest that, as the coverage increases, the initially adsorbed *trans* isomers are converted to the rather more compact *cis* form, facilitating the cleavage of the NN double bond.

The adsorption of molecules possessing highly polarizable aromatic ring systems represents a major challenge for density functional theory (DFT) because of the lack of a correct treatment of dispersive van der Waals interactions by the currently used exchange-correlation energy functionals. To circumvent this limitation, the inclusion of a semi-empirical dispersion correction scheme represents a computationally inexpensive alternative. Following a previous work [2], we have studied the interaction of azobenzene with the TiO₂(110) surface by means of periodic density functional theory, including a semi-empirical dispersion potential due to Grimme (DFT-D2) [3] as implemented in VASP [4].

The adsorption and dissociation of the *cis* and *trans* isomers of azobenzene on the rutile TiO₂(110) surface have been studied and allowed us to assess the importance of the inclusion of the van der Waals dispersion effects for the proper calculation of adsorption geometry and energies.

[1] S.C. Li, U. Diebold, J. Am. Chem. Soc. 132 (2010) 64.

[2] J.P. Prates Ramalho, F. Illas, Chem. Phys. Lett. 501 (2011) 379–384

[3] S. Grimme, J. Comput. Chem. 27 (2006) 1787.

[4] G. Kresse, J. Hafner, Phys. Rev. B 47 (1993) 558.

Voltammetric Study of Copper and Lead Microsamples Immobilized on Carbon Nanotubes Film-Coated Electrode

A. Veiga^{1,2}, J. Teixeira^{1,2,3}, J. Mirão^{2,4}, A. Candeias^{1,2,3,5}, D. Teixeira^{2,3,6}

¹Centro de Química de Évora, ²Laboratório HERCULES, ³Departamento de Química da ECTUE,
⁴Departamento de Geociências da ECTUE e Centro de Geofísica de Évora, ⁵Instituto dos Museus e
Conservação – Laboratório José de Figueiredo, ⁶ICAAM
dinaveiga@yahoo.com

Over the last two decades, it has been demonstrated that the importance of the electrochemical methods in the field of archaeometry of cultural heritage has been significantly increased [1, 2]. This fact has been related, mainly, with the development and application of new methodologies, such as the voltammetry of microparticles [3]. This is based on the voltammetric response of solid microsamples immobilized on the surface of suitable working electrodes, when in contact with an electrolytic solution [1-3]. Through this methodology and making use of a limited kind of working electrodes, such as the paraffin impregnated graphite electrode, the carbon paste electrode and others, it is possible to obtain information about the chemical composition and distribution of electroactive species that comprise the archaeological solid samples [1-3]. In this context, we propose the innovative application of a multi-walled carbon nanotubes film-coated electrode, as an alternative immobilization support for the voltammetric study of these samples. To demonstrate the usefulness of this electrode, we carried out a cyclic voltammetric study, with solid microsamples that contains different chemical forms of copper and lead, in different coordination environments. With this study, we aim to investigate the conditions under which this electrode can be used, to get information about the surface chemical composition (*i.e.*, redox and mineralogical speciation [2]) of oil paintings on copper, from 17th/18th Centuries.

[1] A. Doménech-Carbó, M.T. Doménech-Carbó, V. Costa, *Electrochemical Methods in Archaeometry, Conservation and Restoration*, in Monographs in Electrochemistry, F. Scholz (Ed.), Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2009.

[2] A. Doménech-Carbó, J. Solid State Electrochem., 14 (2010) 363.

[3] F. Scholz, U. Schroder, R. Gulaboski, *Electrochemistry of Immobilized Particles and Droplets*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005.

Acknowledgments. Alfredina Veiga acknowledges Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT) for PhD Grant SFRH/BD/75549/2010.

Avaliação da Actividade Microbiana de Bisfosfonatos Derivados do Indazole

A.M. Fialho,¹ M.R. Martins,^{1,2} G. Matias,¹ S. Arantes,¹ F.C. Teixeira,³ A.T. Caldeira,^{1,4} A.P.S. Teixeira,^{1,4}

¹Departamento de Química da ECT, Universidade de Évora, Évora ²Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas, Universidade de Évora, Évora ³UPCH- Laboratório Nacional de Energia e Geologia, Lisboa, ⁴Centro de Química de Évora, Universidade de Évora, Évora
apsteix@uevora.pt

Os bisfosfonatos (BPs) são um grupo de compostos derivados do ácido bisfosfónico e dos seus sais. Os bisfosfonatos (BPs) são uma classe importante de fármacos com um largo espectro de aplicações no tratamento de doenças do metabolismo mineral do osso, como a osteoporose, a doença de Paget e metástases ósseas, com uma acção inibidora sobre os osteoclastos, promovendo uma diminuição da reabsorção óssea. Recentemente, tem sido estudada a actividade antitumoral dos BPs, não só ao nível das metástases ósseas, mas também no cancro da próstata e da mama. Mais recentemente, têm-lhe sido atribuídas também actividade antiparistária, contra diversos microrganismos e protozoários, incluindo o *Trypanosoma cruzi* e o *Plasmodium falciparum*. [1,2,3]

O trabalho desenvolvido teve por objectivo avaliar a actividade antimicrobiana de bisfosfonatos derivados do indazole (BP1 e BP2) e de um bisfosfonato comercial (Alendronato) face a diferentes estirpes patogénicas de bactérias Gram –, bactérias Gram + e de leveduras utilizando o método de difusão em meio sólido e determinação da concentração mínima inibitória (CMI) para as estirpes sensíveis aos bisfosfonatos. Os compostos em estudo, BP1 e BP2, revelaram actividade antibacteriana para todas as bactérias Gram –, nomeadamente para as estirpes da família *Enterobacteraceae* (*Escherichia coli*, *Klebsiella pneumoniae*, *Morganella morganii*, *Proteus mirabilis*, *Salmonella enteritidis*), tendo apresentado halos de inibição que variaram de 8 a 14mm, muito superiores aos observados para o alendronato (6 mm). Os valores de CMI obtidos para o BP1, composto mais activo, foram de 5mg/ml para as estirpes *Escherichia coli*, *Proteus mirabilis*, *Morganella morganii* e *Salmonella enteritidis* e de 8 mg/mL para a estirpe de *Klebsiella pneumoniae*.

[1] H. Fleisch, *Bisphosphonates in Bone Disease: from the Lab to Patient*, 4th ed., Academic Press, San Diego, 2000.

[2] S. Zhang, G. Gangal, H. Uludag, *Chem. Soc. Rev.*, 36 (2007), 507.

[3] M.B. Martin, J.S. Grimley, J. C. Lewis, H. T. Heath, B. N. Bailey, H. Kendrick, V. Yardley, A. Caldera, R. Lira, J.A. Urbina, S. N. Moreno, R. DoCampo, S. T. Croft, E. Oldfield, *J. Med. Chem.*, 44, (2001), 909.

Agradecimentos. À FCT (FEDER, POCI) pelo financiamento concedido (POCI/QUI/55508/2004 e PPCDT/QUI/55508/2004) e financiamento plurianual do CQE.

Biogas production over olive oil mill wastes

D. Antunes ¹, A. Pereira ¹, M. Banha ¹, A.T. Caldeira ^{1,3}, J.R. Marques da Silva ^{2,4}, J.M. Arteiro ^{1,3}

¹ Departamento de Química da ECT, Universidade de Évora, ² Departamento de Engenharia Rural da ECT, Universidade de Évora, ³ Centro de Química de Évora (CQE), Universidade de Évora, ⁴ Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas (ICAAM), Universidade de Évora.

diogo_af_antunes@sapo.pt

Olive oil mill wastes (OMW) constitute an important environmental problem due to the large amount of phenolic compounds and the high toxicity they present. Additionally when canned olives were produced, a large amount of brine water difficult the treatment of wastes. In the present work a biological approach was applied using *Coriolus versicolor* cultures. The aim of this treatment was to reduce the OMW phenolic content in order to produce methane gas using a mixture of OMW and swine wastes (SW) as inoculums in an aerobic digestion.

The OMW was acquired from a two phase olive oil mill system which also produces canned olives. The biological treatment was carried out using batch cultures at 150 rpm and 28° C. Cultures were preformed in a liquid medium with 100% OMW, 75%, 50% and 25% OMW content. Also a solid-state biological treatment was carried out using 3 liters of OMW and pre-incubated *Coriolus versicolor* cultures. Chemical oxygen demand (COD) and total phenolic content was determined periodically, during 20 days. The biogas production assay was assembled using anaerobic reactors with tree different substrates, treated OMW using batch cultures from 75% OMW, solid-state treated OMW and the untreated OMW. All this substrates were Inoculated with SW.

Coriolus versicolor cultures performed with 25%-75% OMW broth showed a COD decline of 55% to 60% in olive oil residues. Additionally the biological treatment demonstrated an efficient phenolic reduction (80%-90%).

Furthermore this assay results in biogas production using the combination of these substrates with SW, leading to a valuable use of these wastes.

Remoção e metabolização de Dexametasona por plantas da família das macrófitasM. Silva³, C. Serrano³, T. Pires³, A.P. Carvalho¹, A.V. Dordio⁴, A.P. Pinto², D.M. Teixeira²¹Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE, ²ICAM e Departamento de Química da ECTUE, ³Departamento de Química da ECTUE, ⁴IMAR e Departamento de Química da ECTUE

dmt@uevora.pt

A presença de compostos farmacêuticos e seus metabolitos no ambiente aquático tornou-se nos últimos anos um problema ambiental emergente. Assim, tornou-se essencial o desenvolvimento de processos de remoção mais eficientes, como o tratamento de efluentes com leitos construídos de macrófitas (LCM) que, em muitos casos, tem permitido a obtenção de águas residuais finais de boa qualidade.

Este trabalho teve como objectivo avaliar a eficiência de remoção de um anti-inflamatório de origem veterinária, a dexametasona, por um microcosmos de LCM utilizando LECA 2/4 como matriz de suporte, e plantado com *Phragmites australis*. Preliminarmente, foi avaliada a capacidade de adsorção da dexametasona pelo material LECA, a diversas concentrações iniciais, em água e num efluente recolhido após um tratamento secundário. A LECA demonstrou elevada capacidade de remoção da dexametasona, quer em água quer em efluente, embora neste último meio se tenha verificado um ligeira diminuição na eficiência de remoção (~2 %).

Posteriormente foi avaliada a eficiência de remoção da dexametasona alcançada pelo microcosmos de LCM, em dois ensaios realizados em estações do ano opostas (Inverno e Verão), a qual se verificou ter sido muito elevada (~80 %) podendo a maior parte da eficiência ser atribuída à matriz de suporte através de fenómenos de adsorção. No entanto, comparando as remoções alcançadas em leitos plantados e não-plantados verificou-se que as plantas permitiram acelerar significativamente o processo de remoção. As amostras de tecidos de folhas das plantas usadas nos ensaios foram analisadas por LC-ESI-MS, tendo sido possível constatar a presença de DEXA e de dois dos seus metabolitos, o que sugere que a DEXA é absorvida e translocada para a parte área da planta, sofrendo uma rápida metabolização/transformação (num período inferior a 48h).

Os resultados deste estudo apontam para o potencial de utilização dos LCMs, tendo LECA como matriz de suporte e plantados com *Phragmites australis*, para a remoção de DEXA de efluentes contaminados com este anti-inflamatório de origem veterinária.

Valorização dos subprodutos derivados da indústria do azeite: Caracterização biológica dos seus extractos em células humanas de cancro da mama

L. Felício^{1,2}, P. Ramos^{1,2}, J.L. Santos¹, O. Guerreiro^{1,2}, A. Guerra^{1,2}, Z. Velez^{1,2}, L. Garcia¹, A. Caldeira³, M. Duarte^{1,2}

¹Centro de Biotecnologia Agrícola e Agro-Alimentar do Baixo Alentejo e Litoral (CEBAL) / Instituto Politécnico de Beja (IPBeja), 7801-908; ²Centre for Research in Ceramics & Composite Materials (CICECO), Universidade de Aveiro, 3810-193; ³Departamento de Química, Universidade de Évora.
laura.felicio@cebal.pt

A fitoterapia é hoje em dia considerada um suporte emergente da medicina moderna no combate a diferentes tipos de patologias, nomeadamente doenças oncológicas. Este tipo de abordagem representa uma nova alternativa quer a nível da prevenção e/ou tratamento de neoplasias com deficitária resposta terapêutica. Vários estudos têm demonstrado o potencial do azeite, e seus subprodutos na prevenção e tratamento de diferentes tipos de tumores, entre eles o cancro da mama.

O bagaço de azeitona extractado (BAE) é um dos subprodutos da indústria do azeite resultante da valorização adicional do bagaço húmido. Com base em resultados anteriores do Grupo de Compostos Bioactivos do CEBAL, o BAE apresenta um grande potencial fitoterapêutico, não só pela concentração apreciável de Hidroxitirosol (um reconhecido composto fenólico), mas também pelas actividades biológicas identificadas, nomeadamente capacidade anti-oxidante e anti-proliferativa em células humanas de cancro da mama.

O presente trabalho visa a obtenção de extractos aquosos purificados de BAE, com maior actividade biológica, utilizando tecnologia de membranas, nanofiltração e osmose inversa. De acordo com os resultados obtidos, o extracto retido concentrado (ERC) apresentou a maior concentração de fenóis totais na sua composição tal como esperado, uma vez que os fenóis de maior massa molecular foram retidos na membrana NF270. Já o extracto permeado concentrado (EPC) foi o que apresentou a maior percentagem de grau de pureza (20%) em fenóis totais. A quantificação de Hidroxitirosol por HPLC, mostrou que o EPC apresenta a mais elevada concentração, bem como grau de pureza, de Hidroxitirosol, evidenciando a optimização do processo de nanofiltração no enriquecimento deste extracto no referido composto fenólico (rendimento final de 28%). Adicionalmente, o EPC tem um potencial anti-oxidante superior, DPPH e poder redutor, respectivamente, $IC_{50}=8,99\mu\text{g/mL}$ de extracto e $EC_{50}=12,08\mu\text{g/mL}$ de extracto. De futuro pretende-se determinar o efeito citotóxico, bem como a avaliação do potencial anti-proliferativo, dos extractos EPC e ERC, em células humanas de cancro da mama fenótipo triplo negativo, comparativamente com o extracto bruto (EB) de BAE.

Efeito antiproliferativo do extracto de culturas de *Bacillus amyloliquefaciens* em células humanas de cancro da mama

J. Ferreira^{1,2}, A. Guerra^{1,3}, O. Guerreiro^{1,3}, Z. Velez^{1,3}, P. Ramos^{1,3}, L. Felício^{1,3}, L. Garcia¹,
L. Dias⁴, D. Teixeira^{2,4}, A.T. Caldeira^{2,4}, M. Duarte^{1,3}

¹*Centro de Biotecnologia Agrícola e Agro-Alimentar do Baixo Alentejo e Litoral (CEBAL) / Instituto Politécnico de Beja (IPBeja);* ³*Centre for Research in Ceramics & Composite Materials (CICECO), Universidade de Aveiro;* ²*Escola de Ciências e Tecnologia, Departamento de Química e Centro de Química de Évora (CQE), Universidade de Évora.*

⁴*Lab. HERCULES, Universidade de Évora.*

joapauloCF5@hotmail.com

De acordo com a literatura, algumas estirpes de *Bacillus* spp. produzem para o meio exógeno lipopéptidos cíclicos (LC) com relevante actividade biológica, destacando-se o potencial destes lipopéptidos na indução da resposta apoptótica, restrito, a células humanas de leucemia. Até à data não foram ainda testados outros modelos celulares tumorigénicos. O presente trabalho visa o estudo da actividade anti-proliferativa de LC em células humanas de cancro da mama, fenótipo triplo negativo, um dos tumores de mama mais refractários ao tratamento, e consequentemente com uma taxa de mortalidade próxima dos 100%.

De acordo com estudos anteriormente efectuados, foi possível identificar alguns dos LC presentes no caldo de cultura desta estirpe de *Bacillus* [1], obtidos por cultura em *Batch*. Actualmente, está em curso a avaliação do potencial anti-proliferativo dos LC utilizando como modelo *in vitro*, a linha celular de cancro da mama MDA-MB-231.

Resultados preliminares mostram que existem diferentes tipos de LC no caldo de cultura (m/z 1046 1436 e 1478). A incubação de células MDA-MB-231, durante 48h com concentrações crescentes do extracto de caldo de cultura, sugere uma remissão na proliferação celular.

[1] Caldeira A.T., Savluchinske-Feio S., Arteiro Santos J.M., Coelho, A.V., Roseiro J.C (2008) "Environmental dynamics of *Bacillus amyloliquefaciens* CCM1051 antifungal activity under different nitrogen patterns". Journal of Applied Microbiology, 104, 808–816.

***Amanita ponderosa* mushrooms:
molecular and inorganic profile and toxicological evaluation**

C. Salvador ^{1,2}, M.R. Martins ^{1,3}, J.M. Arteiro ^{1,2}, A.T. Caldeira ^{1,2}

¹*Departamento de Química da ECT, Universidade de Évora,* ²*Centro de Química de Évora (CQE),
Universidade de Évora,* ³*Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas (ICAAM),
Universidade de Évora.*

katia_salvador@hotmail.com

Amanita ponderosa are wild eatable mushrooms that grow in some microclimates, particularly in Alentejo and Andalusia. Due to the symbiotic relation, mushrooms can accumulate high metal concentrations, consequently is important to estimate the trace metal contents to assessing exposure risks. Some mushrooms contain many different dietary nutrients with high antioxidant activity, such as phenolic compounds and vitamins. Polysaccharides of mushrooms are bioactive ingredients involved in antimicrobial, antitumoral and anti-inflammatory properties. In fact, mushrooms are attractive as functional foods. The aim of this study was to characterize the molecular and inorganic profile of some *A. ponderosa* strains and evaluated toxicological effects of phenolic and protein-polysaccharide extracts against *Artemia salina*.

The molecular profile of *A. ponderosa* strains collected from different places of Alentejo region and Andalusia were analyzed by M13-PCR [1]. Mineral content of mushrooms and soil samples were quantified by flame atomic absorption spectrometry (Ca, Mg, Fe, Cu, Zn, Mg), flame emission photometry (Na, K) and molecular absorption spectrometry (P). Phenolic contents and protein-polysaccharide complexes of mushrooms extracts were quantified using the methods of Folin-Ciocalteu and phenol/sulphuric acid [2], respectively. Molecular approach using microsatellite primer M13 allowed to distinguish the mushrooms at specie level and to differentiate the *A. ponderosa* strains according to their location. *A. ponderosa* strains showed different metal composition according to their geographical area. Besides, all the strains tested showed levels of metals contents acceptable to the human consumption. Phenolic and protein-polysaccharide extracts presented no toxicity for the all *A. ponderosa* strains, with mortality of *Artemia salina* lower than 6%. Further studies are in progress in order to isolate and characterize the extracted compounds and to evaluate its bioactivity, namely, the antitumoral activity.

- [1] Caldeira, A.T., Salvador, C., Pinto, F., Arteiro, J.M., Martins, M.R. (2009). MSP-PCR and RAPD Molecular Biomarkers to characterize *Amanita ponderosa* mushrooms. *Annals of Microbiology*, **59** (3) pp. 1-6.
- [2] Arteiro, J.M., Martins, M.R., Salvador, C., Candeias, M.F., Karmali, A., Caldeira, A.T. (2011). Protein-Polysaccharides of *Trametes versicolor*: Production and Biological Activities. *Medicinal Chemistry Research*, DOI: 10.1007/s00044-011-9604-6.

Agradecimentos. This work was supported by FCT, SFRH/BD/61184/2009.

Fenilureias diminuem a actividade enzimática glucose-6-P desidrogenase de *Saccharomyces cerevisiae* UE-ME₃

H. Tenda², M. Candeias², M. Pinheiro², I. Alves-Pereira^{1,2}, R. Ferreira^{1,2}

¹Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas (ICAAM-UE) e

²Departamento de Química da ECTUE, Portugal

raf@uevora.pt

64

O enzima glucose-6-fosfato desidrogenase (EC 1.1.1.49, G6PD), catalisa o primeiro passo da via das pentoses fosfato, gerando equivalentes redutores sob a forma de NADPH. Assiste assim à lipogénese e à produção de ribose-5-fosfato, precursor dos nucleótidos. Do ponto de vista biomédico, o estudo dos factores que influenciam esta actividade catalítica em leveduras, é pertinente devido à homologia com G6PD humana, cuja perda total é fatal para os seres humanos, enquanto que a perda parcial pode gerar icterícia neonatal e anemia hemolítica. O diurão, ou 3-(3,4-diclorofenil)-1,1-dimetilureia e o isoproturão ou (3-(4-isopropil) fenil-1,1-dimetilureia) constituem princípios activos de herbicidas amplamente utilizados em zonas urbanas e na agricultura devido às suas propriedades fitotóxicas, ao bloquearem a cadeia de transporte de electrões do cloroplasto, gerando *stress* oxidativo. O principal objectivo deste trabalho foi comparar a resposta do diurão um poluente orgânico persistente com a resposta ao isoproturão, por *Saccharomyces cerevisiae* UE-ME₃. Células de levedura, crescidas até à fase exponencial em banho de água com agitação orbital e temperatura controlada a 28°C, foram inoculadas nas mesmas condições, na ausência e na presença de diurão, ou de isoproturão, durante 3 ou 72 h. Após a exposição, amostras de células de cada tratamento foram colhidas e homogeneizadas por ultra-sons. A fracção pós-peroximal obtida por centrifugação diferencial do homogeneizado a 3000 *g* e 12000 *g* foi utilizada para determinar-se a actividade G6PD de acordo com Postma [1], registando-se o incremento de absorvência a 340 nm. A concentração de proteínas foi determinada pelo método de Lowry [2]. Os resultados mostram que as duas fenilureias diminuem significativamente esta actividade catalítica em células em fase replicativa e senescente, expostas a níveis superiores a 25 µM, sendo esse efeito superior na presença de diurão, facto que evidencia uma maior toxicidade deste composto, por bloqueio energético e da divisão celular. Contudo observou-se um incremento significativo desta actividade enzimática em células replicativas expostas ao diurão (5 µM), resposta que pode ser interpretada como adaptativa da população por um processo activo de morte.

[1] Postma E, Verduyn C, Scheffers WA, Van Dijken JP (1989) *Appl Environ Microbiol*, 55, 468–77.

[2] Lowry, OH, Rosebrough NJ, Farr AL e Randall RJ (1951) *J Biol Chem.*, 193, 265-75.

Agradecimentos. À Fundação para a Ciência e Tecnologia, CALL 2010, financiamento plurianual do ICAAM

Expressão diferencial de glutathione S-transferase citoplasmático de juvenis de *Petromyzon marinus*, L. da bacia do Vouga

M. Candeias³, I. Alves-Pereira^{1,3}, M.J. Lança^{1,4}, R. Ferreira^{1,3}, P.R. Almeida^{2,5}

¹Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas (ICAAM-UE)

²Departamento de Biologia ³Departamento de Química, e ⁴Departamento de Zootecnia da ECTUE,

⁵Centro de Oceanografia, (CO-FCUL), Portugal

raf@uevora.pt

As lampreias são vertebrados aquáticos representantes da divisão Agnata. Após a eclosão dos ovos, as larvas das lampreias ou amocetes, enterram-se no leito dos rios, nas zonas arenosas e filtram água para se alimentarem. A fase larvar tem uma duração aproximada de 5 anos. Após a metamorfose, os juvenis de lampreia executam a migração trófica em direcção ao mar, onde permanecem cerca de dois anos a parasitar peixes. Quando chega a altura de se reproduzirem, deixam de se alimentar e iniciam a migração em direcção aos rios, onde desovam. A poluição em água doce pode despoletar respostas moleculares precoces que condicionam a migração dos juvenis e posterior sobrevivência no mar. Como a lampreia-marinha é muito apreciada na nossa gastronomia regional, é alvo de uma intensa pesca dirigida, por altura da migração reprodutora anual, um dos muitos factores que a levam a ser classificada como uma espécie vulnerável e que interessa preservar. O principal objectivo deste trabalho foi avaliar como a conjugação de xenobióticos com o glutathione mediada por glutathione S-transferase (E C 2.5.1.18, cGST) citoplasmáticos é afectada pelo ambiente da bacia, em particular pela concentração salina do meio. Juvenis capturados na bacia do Vouga foram colocados em tanques com níveis de salinidade diferente (0-35 psu) pelo período máximo de 30 dias. O sobrenadante de cinco *pools* de brânquias (#5) e de fígado (#8) homogeneizados em KCl (0,154 M) em tampão Tris-HCl (50 mM) pH 7,4 e centrifugados a 105000 *g* foram utilizados na determinação da actividade cGST [1]. Os resultados mostram que a actividade hepática nos indivíduos recém-chegados era significativamente superior à obtida em outras bacias Portuguesas, relação inversa à detectada nas brânquias. O contacto com o ambiente salino durante 30 dias causou decréscimo significativo desta actividade enzimática no fígado e incremento no tecido branquial, facto que sugere proveniência de uma bacia poluída, cujos contaminantes estariam a ser metabolizados por sistemas de biotransformação hepáticos após indução bifuncional, via receptores Ah. O mecanismo de resposta branquial parece ser monofuncional e distinto do hepático.

[1] Habig WH, Pabst MJ e Jakoby WB (1974), *J. Biol. Chem.* 249, 7130-7139.

Agradecimentos. À Fundação para a Ciência e Tecnologia, projecto PTDC/BIA-BEC/103258/2008.

Proliferação de *Saccharomyces cerevisiae* na presença de metais de transiçãoJ. Agostinho², J. Capela-Pires², R. Ferreira^{1,2}, I. Alves-Pereira^{1,2}¹*Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas (ICAAM-UE) e*²*Departamento de Química da ECTUE, Portugal**iap@uevora.pt*

A fosfatase alcalina (EC 3.1.3.1) é uma hidrolase com distribuição ubíqua na natureza que reconhece fosfo-ésteres como substrato e exibe um óptimo de pH à volta de 9,0. O controlo do crescimento e a regulação do metabolismo celular eucariota é modelado por reacções de fosforilação/desfosforilação que modelam a divisão, diferenciação, desenvolvimento e morte celular. Neste trabalho recorreu-se à determinação da actividade fosfatase alcalina para avaliar, o efeito de metais de transição como o vanádio ou o titânio sobre a proliferação celular de *Saccharomyces cerevisiae*. Por outro lado, procurou-se avaliar como sumos naturais de maçã, interferem no efeito tóxico do pentóxido de vanádio. *S. cerevisiae* UE-ME₃, depositada na colecção da Universidade de Évora, em fase exponencial média, foram inoculadas em meio YEPD líquido, na ausência ou na presença de nanopartículas de dióxido de titânio (0,1 µg/mL), ou de pentóxido de vanádio (2,0 mM), ou ainda de pentóxido de vanádio (2,0 mM) e sumo de maçã (5 %) e deixadas crescer a 28 °C durante 72 h. No final da cultura foram recolhidas amostras e levadas à secura a 80 °C, para determinação de peso seco. As restantes células foram ressuspensas em tampão fosfato (10 mM) pH 7,0 e lisadas por ultra-sons. O conteúdo em proteínas foi determinado segundo Lowry [1]. A actividade enzimática fosfatase alcalina foi determinada de acordo com Bretaudiere [2]. Os resultados mostram que em células crescidas na presença de nanopartículas de titânio ou de pentóxido de vanádio ocorreu um decréscimo significativo de unidades formadoras de colónias, bem como, da actividade específica fosfatase alcalina. Contudo, *S. cerevisiae* crescidas na presença de pentóxido de vanádio, um pró-oxidante, e sumo de maçã *golden* mostraram uma reversão significativa da citototoxicidade do vanádio (28 %). Os resultados evidenciam a viabilidade deste modelo para quantificar *in vivo* a protecção antioxidante de sumos de fruta.

[1] Lowry, OH, Rosebrough NJ, Farr AL e Randall RJ (1951) *J Biol Chem.*, 193, 265-75.

[2] Bretaudiere JP e Spillman T(1984) Alkaline Phosphatases. In: Bergmeyer – *Methods of Enzymatic Analysis*, Volume II, Samples, Reagents, assessment of Results, 3rd ed., Verlag Chemie, Florida.

Agradecimentos. À Fundação para a Ciência e Tecnologia, CALL 2010, financiamento plurianual do ICAAM.

Biotecnologia aplicada ao Património: Biodegradação de Pinturas Murais do séc. XVIC. Sousa¹, M.R. Moita¹, A.T. Caldeira^{1,2,3}, M.R. Martins^{1,3,4}, M. Gil³, J. Mirão^{3,5}, A. Candeias^{1,2,3,6}

¹*Departamento de Química da ECT, Universidade de Évora,* ²*Centro de Química de Évora, Universidade de Évora,* ³*Laboratório HERCULES – Herança Cultural Estudos e Salvaguarda, Universidade de Évora,* ⁴*Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas, Universidade de Évora,* ⁵*Departamento de Geociências e Centro de Geofísica de Évora, Universidade de Évora,* ⁶*Laboratório José de Figueiredo, Instituto dos Museus e Conservação*
mrm@uevora.pt

A antiga igreja paroquial de Santo Aleixo está situada a cerca de oito quilómetros a noroeste de Montemor-o-Novo, na Herdade do Raimundo. É um edifício quinhentista, de estrutura simples, que possui uma das mais belas pinturas murais renascentistas realizadas no país e que há vários anos, se encontra em avançado estado de abandono. O que resta do conjunto de pinturas murais deste monumento em ruína, encontra-se a revestir a parte do fundo da nave e ainda um pano no lado norte da parede da testeira da nave.

Este trabalho teve como principais objectivos avaliar a biodeterioração dessas pinturas, com vista a isolar e identificar as diferentes populações de microrganismos presentes, e a desenvolver metodologias moleculares que permitam estabelecer de relações filogenéticas dos agentes biodeteriogénicos de origem fúngica.

A caracterização dos frescos foi efectuada por micro-amostragem e microanálise de secções transversais por microscopia óptica, análise microquímica e microscopia electrónica de varrimento (SEM-EDS), permitindo a identificação de pigmentos e a análise estratigráfica. Para o estudo microbiológico procedeu-se à recolha de amostras utilizando bisturis e zaragatoas estéreis [1]. A morfologia das colónias foi analisada por microscopia óptica. A coloração de Gram, o teste da oxidase e o teste da catalase, foram utilizados para caracterização das bactérias. A identificação dos fungos foi efectuada com base nas suas características macroscópicas e microscópicas, tais como, textura e coloração das colónias, morfologia das hifas e estruturas reprodutoras (no caso dos isolados esporulados). Para o estudo molecular procedeu-se ao isolamento do DNA das estirpes fúngicas e à amplificação com o primer M13 (MSP-PCR) [2], com vista a estabelecer diferentes *fingerprintings* genéticos, entre os principais agentes biodeteriogénicos de origem fúngica.

[1] Martins M.R., Fialho S., Lima M., Tavares D., Mirão J., Valadas S., Candeias A.E. (2009). Biodegradation assessment of a 16th century fresco from Southern Portugal. *Microscopy and Microanalysis*, 15 (3): 65-66.

[2] Caldeira A. T., Salvador C., Pinto, F., Arteiro, J. M., Martins M. R. (2009). MSP-PCR and RAPD Molecular Biomarkers to characterize *Amanita ponderosa* Mushrooms. *Annals of Microbiology*, 59 (3) 629-634.

**A paleta e os pigmentos do pintor José de Escobar (séc. XVI-XVII):
estudo analítico das pinturas murais do coro-baixo do convento de N^a Sr^a da
Saudação (Montemor-o-Novo)**

M.Gil^{1,2}, A. Ferreira¹, L. Dias¹, S. Valadas¹, A.Cardoso³, M.J. Oliveira³, M. L. Carvalho¹,
J.Mirão^{1,4}, A.Candeias^{1,3,5}

¹ Lab. HERCULES, Universidade de Évora

² Centro de Física Atómica, Universidade de Lisboa

³ Laboratório de Conservação e Restauro José de Figueiredo, IMC

⁴ Centro de Geociências, Universidade de Évora

⁵ Centro de Química de Évora, Universidade de Évora

milenegil@gmail.com

68

José de Escobar, eborense de ascendência castelhana (1585-1622), foi um dos pintores mais activos na região do Alentejo durante a época de ouro da pintura mural portuguesa. A ele e à sua oficina estão atribuídas, por comparação estilística, uma série vasta de pinturas, de intenso cromatismo[1]. Disso é exemplo o ciclo de pinturas murais, de cariz religiosa, existentes no coro-baixo do convento de Nossa Senhora da Saudação na cidade de Montemor-o-Novo. Estas foram recentemente alvo de uma campanha que teve como objectivos conhecer melhor este pintor através da caracterização da paleta cromática, identificação dos pigmentos e da técnica pictórica utilizada. Este estudo foi efectuado *in situ* com espectrofotometria e colorimetria no visível, complementado com DRX e microscopia óptica e electrónica (SEM-EDS) de secções transversais de micro-amstras de camadas cromáticas.

Os resultados demonstram uma paleta rica em nuances traduzidas pelas coordenadas cromáticas do espaço de cor CIEL*a*b*. Estas foram obtidas pela utilização de pigmentos terra (ocres vermelhos e amarelos), pigmentos verdes à base de cobre, que se encontram actualmente alterados (e.g. atacamite e paratacamite) e azul de esmalte.

Os primeiros dados adquiridos permitem ter um conhecimento aprofundado dos materiais empregues por este pintor, e possivelmente pelos seus colaboradores, assim como ter uma percepção das alterações cromáticas induzidas pelo estado de conservação dos pigmentos.

[1] V. Serrão, *A Pintura Protá-Barroca em Portugal*, Dissertação de Doutoramento em História de Arte apresentada à Faculdade de Letras da Universidade de Coimbra, 1992.

Agradecimentos. Os autores desejam agradecer a Fundação para a Ciência e Tecnologia através da bolsa de Pós-Doc. SFRH/BPD/63552/2009, financiada pelo programa POCI2010 e QREN-POPH-tipologia 4.1. e comparticipada pelo fundos FSE e MCTES. Ao lab HERCULES e EEGrants.

As argamassas da cidade romana de *Ammaia* – um estudo interdisciplinarI. Cardoso⁽¹⁾, M. F. Macedo⁽²⁾, S. Valadas⁽³⁾, L. Rosado⁽³⁾, A. Candeias⁽³⁾, J. Mirão⁽⁴⁾⁽¹⁾ *Lab. HERCULES, Universidade de Évora, Portugal*⁽²⁾ *VICARTE, Departamento de Conservação e Restauro, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa, Portugal*⁽³⁾ *Lab. HERCULES & CQE, Universidade de Évora, Portugal*⁽⁴⁾ *HERCULES & CGE, Universidade de Évora**ineslemoscardoso@gmail.com*

De acordo com as evidências históricas e arqueológicas, a Cidade Romana de *Ammaia* (Marvão, Portugal) terá sido fundada no século I d.C., atingindo o seu auge nos séculos I-II d.C., como importante centro urbano da Lusitânia [1]. Progressivamente, terá sido abandonada até ao século IX, não sendo conhecida até ao momento ocupação posterior. Nos 15 anos de escavações, foram postas a descoberto diversas estruturas arqueológicas da Porta Sul, a praça de entrada na cidade, a área do Forum, as termas, e sob o actual Museu, uma zona habitacional. A área das ruínas encontra-se actualmente sob protecção da Fundação Cidade de *Ammaia* e a orientação científica da Universidade de Évora.

Para a presente investigação salientam-se as argamassas, materiais de construção cuja preparação depende directamente da quantidade e qualidade da matéria-prima disponível. As argamassas são potencialmente reveladoras do conhecimento das tecnologias de construção/produção artística de uma sociedade, da sua relação com a envolvente e da compreensão da sua evolução (incluindo posteriores intervenções de reconstrução). A metodologia de estudo aplicada às argamassas da *Ammaia* tem vindo a ser desenvolvida nos últimos 8 anos, em diversos casos de estudo [2]. Métodos como a microscopia óptica, a DRX, a ATG, o SEM-EDS e análise química foram algumas das técnicas utilizadas, que permitiram a identificação da composição mineralógica dos ligantes, dos agregados, das propriedades hidráulicas conferidas por aditivos (ex: pozolanas, fragmentos de tijolo, etc.), da relação ligante/agregado e a análise do seu estado de conservação. As informações obtidas são ainda essenciais para o desenvolvimento de argamassas compatíveis, que poderão ser utilizadas em futuras acções de conservação/restauro.

[1] Vermeulen F. *et al.* (2005) *Geoarchaeological observations on the Roman town of Ammaia*, Internet Archaeology, 19, pp. 1-28

[2] Silva, A.S. *et al* (2010) *Characterization of Historical Mortars from Alentejo's Religious Buildings*, International Journal of Architectural Heritage, 4 (2) April 2010, pp. 138-154

Agradecimentos: Fundação para a Ciência e Tecnologia - Projecto PTDC/HIS-ARQ/103227/2008 e União Europeia (People - Marie Curie Action) – Projecto Radio-Past.

Cerâmicas da Idade do Ferro II do depósito votivo de Garvão

L. Rosado¹, A. E. Candeias¹, P. Moita², F. Mayet³, M.C. Lopes³, D. Tavares⁴, R. Alfenim^{3,4}, J. Mirão²

¹Laboratório HERCULES, Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE,

²Laboratório HERCULES, Centro de Geofísica de Évora e Departamento de Geociências da ECTUE,

³Universidade de Coimbra e CEAUCP, ⁴Direcção Regional de Cultura do Alentejo

lrosado@uevora.pt

Garvão foi um importante local sagrado da Idade do Ferro II, onde em 1982 foi acidentalmente descoberto um impressionante depósito votivo [1]. Na escavação foram recuperados uma enorme variedade de materiais, sobretudo cerâmica, os quais foram depositados intencionalmente e cuidadosamente organizados de modo a otimizar o espaço disponível. A cerâmica recuperada mostra que durante a Idade do Ferro este sítio arqueológico foi um ponto de fusão das sociedades ibéricas com fortes influências celtas (interior da Península Ibérica) e do mundo Mediterrâneo.

A análise estilística das cerâmicas permitiu a classificação do conjunto cerâmico em diferentes grupos tipológicos. Relacionando o estudo material com aspectos geológicos pretende-se contribuir para uma melhor compreensão das sociedades que produziram estas cerâmicas e das suas interacções no SW da Península durante a Idade do Ferro II. Deste modo, estabeleceu-se uma metodologia de estudo multi-analítica. Aplicando técnicas modernas das ciências dos materiais e os princípios da ciências físicas (por exemplo, geologia e química) pode-se obter respostas e uma melhor compreensão da importância de Garvão nesta área da Península Ibérica. A combinação de técnicas como microscopia electrónica com possibilidade de análise elementar, difracção de raios-X e análise térmica permitem identificar a composição mineralógica destas cerâmicas que extrapolada para a geologia regional, permitem importantes contributos para o conhecimento das sociedades que produziram estes materiais de uso comum. Especial ênfase é concedida à fonte de proveniência das matérias-primas, aos aspectos tecnológicos e, às rotas de circulação de mercadorias, ideias e crenças religiosas.

Os primeiros resultados [2] são sobre um grupo de cerâmicas em que foram utilizados dois tipos de matérias-primas: um núcleo inicial com desgordurantes mais grosseiros e a construção da peça com material mais fino.

[1] C. Beirão et al., *O Arqueólogo Português*, 3 (1985) 45-136

[2] L. Rosado et al. In *IMA2010, Bonds and Bridges: Mineral sciences and their applications*, Budapeste (2010), Livro de Resumos. p. 122

Agradecimentos. Este trabalho é financiado pela FCT através do projecto GODESS e da bolsa de Doutoramento SFRH/BD/67093/2009. Os autores agradecem o apoio da Câmara Municipal de Ourique.

Textiles: How, What and Why?

L. Tobias¹, H. Mestre¹, S. Salvador¹, A. Manhita¹, D. Teixeira², J. Mirão³, A. Candeias^{1,4},
C. Dias¹, T. Ferreira¹

¹Lab. HERCULES & CQE & DQ/ECTUE, ²Lab. HERCULES & ICAAM & DQ/ECTUE, ³Lab. HERCULES & CGE & DQ/ECTUE, ⁴Museums and Conservation Institute, Lisbon, Portugal.
tasf@uevora.pt

The production of fabrics and their coloration precedes recorded history. Several cultures had established dyeing technologies before 3000 BC. These ancient artisans transformed the available natural fibres – linen, cotton, wool and silk – into fabrics, at first by hand, and later using simple mechanical devices [1]. Dyeing of textiles was performed using natural organic materials, being replaced only during the last one and a half centuries by synthetic dyes which are cheaper, more convenient to obtain and produce more reproducible hues.

The role of textile dyeing was mainly a decorative one, to please the spectator or the person that wore dyed textiles, but at the same time a representation of power and wealth, since good-quality dyestuffs could be as precious as gold or silver [2]. Textiles in museums are primary evidence for the production, trade and use of dyed clothing, furnishings, decoration, etc, across all social levels. Aspects of a nation's past economic, social and cultural history can be revealed through the quality and the patterns of the textiles manufactured and the dyes and the metal threads used in their production [3].

Nowadays, the most important step during textile conservation is the identification of materials originally applied in order to understand the nature of their gradual chemical and physical degradation [4]. Analytical techniques as optical microscopy (OM), SEM-EDS, LC-DAD-MS and ICP-AES are among the most employed techniques for the textile characterization studies [5].

In our group, a large amount of work has been devoted to textile's characterization, belonging to distinct typologies. Among them, several studies on Arraiolos carpets belonging to the MNAA collection were performed. With this goal, a large amount of wool standard samples, dyed with traditional natural dyes from the Alentejo region were prepared and also characterized. More recently, the material study of the Évora Inquisition Banner was started in order to assess its restoration.

[1] A.D. Broadbent, Basic Principles of Textile Coloration, Society of Dyers and Colourists, England (2001).

[2] E. Rosenberg, Anal. Bioanal. Chem., 391 (2008) 33.

[3] I. Surowiec, A. Quye, M. Trojanowicz, J.Chrom. A, 1112 (2006) 209.

[4] I. Rezić, L. Ćurković, M. Ujević, Talanta, 82 (2010) 237.

[5] A. Karatzani, X-Ray Spectrom., 37 (2008) 410.

Geochemical characterization of alkaline gneissic rocks of Alentejo (Portugal)J. Carrilho Lopes¹, J. Munhá², C. Pin³, J. Mata²¹*Departamento de Geociências, Universidade de Évora & Centro de Geologia da Universidade de Lisboa, Portugal.*²*Departamento de Geologia & Centro de Geologia da Universidade de Lisboa, Portugal.*³*Département de Géologie, C.N.R.S., Université Blaise Pascal, France.*
carrilho@uevora.pt

This study presents and interprets, on a petrological/petrogenetic point of view, a set of mineral and whole-rock geochemical data collected from the so called “Alkaline Province of Northeast Alentejo”, a group of gneisses that outcrops in lithostratigraphic domains known as Ossa-Morena Zone and Blastomilonitic Belt. It's composed by felsic gneissic rocks of (per)alkaline type, represented by syenites with sodic inosilicates (riebeckite and/or aegirine), nefelinic syenites and hastingsitic syenites, as well as hedenbergitic granites. Most of riebeckitic syenites presents $(Zr/Nb) < 10$, $(Y/Nb) < 0.7$ e $(Th/Nb) < 0.3$, while hastingsitic ones and hedenbergitic granites reveal higher values of these ratios (15.0, 2.0 e 0.6, respectively). The highest contents of Zr (4800 ppm) are also observed on peralkaline terms, with minimum values measured on alkaline granites (135 ppm). Maximum contents of F (6100 ppm) and Cl (7233 ppm) have been determined on riebeckitic and nefelino-sodalitic syenites, respectively, and seems that halogenous contents may be correlated with devolatilization processes, deformation/micro-fracturation and REE mobility. Even though irregular crystallization of phases which consume high contents of REE (e.g. allanite) can disturb the correspondent geochemical signatures, it is still possible to identify, in most of the cases, distinctions between maximum values of $(La/Sm)_N$, $(La/Lu)_N$ and $(Gd/Lu)_N$ of peralkaline rocks (29.6, 11.6, 2.4), hastingsitic syenites (14.8, 4.8, 2.0) and alkaline granites (4.0, 3.1, 1.7). Riebeckitic and nefelinic facies present, simultaneously, the sharpest negative anomalies of Ti and the less marked negative anomalies of Nb (means of 0.9 and 0.7), which can be interpreted as a result of differentiation processes with small to moderate contributions of crustal contamination; comparatively, this anomaly is higher in hastingsitic (0.6) and granitic terms (0.4). Obtained in a small set of mafic and felsic samples, Rb-Sr and Sm-Nd isotopic data, show the vulnerability of the first system to post-magmatic processes. Peralkaline rocks show $(+2.5 < \epsilon Nd_{480} < +4.9)$ values which reflect the origin of these magmas from time-integrated depleted mantle sources, that were enriched in LREE at the time of, or shortly before, the igneous episode in an intracontinental rift setting. Sr-Nd petrogenetic modelling adds complementary information: i.) intracontinental alkaline character of (primary) basaltic magmas as precursors of this alkaline province; ii.) low to moderate crustal contamination during differentiation processes, namely 7% to 20% for peralkaline syenites and about 26% for alkaline granites.

**Análise comparativa de duas metodologias de ensino na Química de oitavo ano:
vantagens e desvantagens da metodologia tradicional
e da metodologia Investigativa**

M.G.G. Cordeiro¹, M.R.D.T. Figueiredo²

¹*Escola EBI de André de Resende, Évora*

²*Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE*

mtf@uevora.pt

73

A importância que as actividades experimentais de natureza investigativa assumem na aprendizagem das ciências, no Ensino Básico, depende, sobretudo, da sua consistência com os objectivos da Educação em Ciência e do envolvimento do aluno.

O estudo das suas vantagens, relativamente a uma metodologia tradicional, constituiu o objectivo central deste estudo que incidiu no tema Reacções Químicas e envolveu duas turmas de 8º ano. O estudo desenvolveu-se segundo um desenho quasi-experimental, tendo a recolha de dados sido efectuada através de um Inquérito por questionário e de registos de aula efectuados pela professora/investigadora.

O estudo decorreu durante o ano lectivo 2009/2010, tendo sido desenvolvidas, pelo Grupo experimental, actividades experimentais no âmbito dos temas: Reacções Ácido – Base, Reacções de Precipitação e Reacções de Oxidação – Redução.

As actividades foram realizadas pelos alunos do Grupo Experimental, seguindo uma metodologia investigativa, enquanto no Grupo de Controlo foram desenvolvidas as actividades propostas seguindo uma metodologia tradicional, a partir do fornecimento de um protocolo experimental.

Os resultados obtidos revelaram, a existência de algumas dificuldades na selecção e síntese da informação e na comunicação de resultados, mas evidenciaram opiniões bastante favoráveis dos alunos do Grupo Experimental. Puseram ainda em evidência o papel determinante da reflexão, antes, durante e após a realização da actividade e indicaram desenvolvimento conceptual e procedimental significativo, relativamente ao tema desenvolvido.

Foi ainda possível concluir que a metodologia utilizada permitiu aos alunos desenvolver um conjunto de competências essenciais, tais como a autonomia, as capacidades de pensamento e de formulação de questões e de hipóteses explicativas, bem como de comunicação e discussão de resultados.

A Experiência de Ørsted**Contributos da História e Filosofia da Ciência para a sua valorização didáctica**N. Caldeira¹, M. Valente²¹*Escola EBI de André de Resende, Évora*²*Departamento de Física da ECTUE e CEHFCi**nlpc123@gmail.com*

74

Em Copenhaga as novas ideias em Química foram ensinadas, com grande sucesso, divulgadas e recriadas linguisticamente por Ørsted, entre 1812 e 1820. No ano lectivo 1819-1820 Ørsted fazia uma sessão, uma vez por mês, para um grupo de alunos avançado sobre as novas descobertas em Física e Química. Em Abril de 1820, há um acontecimento, numa dessas sessões, que tem sido objecto de interesse para muitos Historiadores da Ciência: pequeno desvio de uma agulha magnética quando passava corrente eléctrica num circuito. Descoberta por acaso? Qual a novidade (desde há vários anos a relação entre electricidade e magnetismo era preconizada)? Em que consistiu esta experiência que vem colocar em causa a existência única de forças centrais? Quais as consequências, científicas e tecnológicas, deste acontecimento?

Esta experiência tem a singularidade de nascer em contexto didáctico. Fará parte dos manuais escolares de ensino da Física ao longo dos séculos XIX e XX (ver, por exemplo, Ganot - segunda metade do século XIX – ver, por exemplo Álvaro Machado – primeira metade do século XX). Hoje, o nome já nem é referenciado e o efeito magnético da corrente eléctrica aparece como uma evidência. Contrariamente a Faraday, Ørsted é pouco referenciado e é com ele que tudo começa. Recuperar historicamente a experiência de Ørsted é introduzir o pensamento na aprendizagem das ciências.

Actualmente é inquietante a falta de motivação dos jovens estudantes para as áreas científicas. Acreditamos que esta tendência pode ser contrariada se promovidos ambientes de aprendizagem articulados com apontamentos de História e Filosofia das Ciências. Neste trabalho apresentamos um estudo sobre esta temática, ilustrado com uma aplicação feita ao ensino da Física e Química, que incorpora as orientações programáticas de cariz CTSA (Ciência Tecnologia, Sociedade e Ambiente) do Currículo Nacional do Ensino Básico Português. Para o efeito foi escolhida uma experiência histórica que merecia ser valorizada, pois teve uma enorme repercussão científica, social e tecnológica, faz parte dos manuais escolares desde o século XIX e teve a singularidade de nascer em contexto didáctico: a Experiência de Ørsted.

O trabalho envolveu a recriação da experiência em sala de aula, contextualizando-a com elementos de uma narrativa construída.

Índice de Autores

A

J	Agostinho	P.30	D	Antunes	P.23
R	Alfenim	P.34	S	Arantes	P.22
PR	Almeida	P.29	JMS	Arteiro	O.08, O.09, P.23,
I	Alves-Pereira	P.28, P.29, P.30			P.27

75

B

M	Banha	P.23	AJ	Burke	O.02
PC	Branco	P.17			

C

N	Caixinha	P.02	A	Cardoso	P.32
AT	Caldeira	O.09, P.22, P.23, P.25, P.26, P.27, P.31	I	Cardoso	P.33
N	Caldeira	P.38	PJM	Carrott	O.01, O.06, P.01, P.02, P.03, P.04, P.05, P.06, P.08,
MF	Camões	PC.05			P.09
AJ	Candeias	O.04, O.07, P.21, P.31, P.32, P.33, P.34, P.35	C	Carvalhal	P.02
M	Candeias	P.28, P.29	AJP	Carvalho	P.18, P.19, P.24
MF	Candeias	O.09	ML	Carvalho	P.32
IPP	Cansado	P.01, P.03	JE	Castanheiro	P.15
AMTM	Canto	P.18	C	Colaço	PC.02
J	Capela-Pires	P.30	AF	Conde	O.03
			MGG	Cordeiro	P.37

D

C	Dias	O.04, O.07, P.35	AV	Dordio	P.24
L	Dias	O.07, P.26, P.32	M	Duarte	P.25, P.26
S	Dias	O.11			

E

MLSC	Esteves	O.05			
-------------	----------------	------	--	--	--

F

AI	Falcão	P.03	AM	Fialho	P.22
L	Felício	P.25, P.26	MT	Figueiredo	O.05, P.37
A	Ferreira	P.32	EJM	Filipe	P.19
J	Ferreira	P.26	C	Freire	PC.03
RA	Ferreira	P.28, P.29, P.30	RV	Freire	O.07
T	Ferreira	O.04, P.35			

G

C	Galacho	P.01, P.02, P.05	L	Garcia	P.25, P.26
		P.06			
A	Galego	P.06	MH	Garcia	P.11, P.12, P.14
A	Guerra	P.25, P.26	M	Gil	P.31, P.32
J	Garcia	O.08	O	Guerreiro	P.25, P.26

H

C	Herdes	P.10			
----------	---------------	------	--	--	--

I

F	Illas	P.20			
----------	--------------	------	--	--	--

L

C	Laginhas	O.06, P.05, P.06, P.07, P.09	B	Ledesma	P.07
MJ	Lança	P.29	JC	Lopes	P.36
			MC	Lopes	P.34

M

MF	Macedo	P.33	PJ	Mendes	P.11, P.12, P.13, P.14
A	Manhita	O.04, P.35			
LM	Marques	P.04	J	Mirão	O.07, P.21, P.31, P.32, P.33, P.34, P.35
LFG	Martins	P.19			
MR	Martins	O.09, P.22, P.27, P.31			
S	Martins	P.16, P.17	MR	Moita	P.31
J	Mata	P.36	P	Moita	P.34
G	Matias	P.22	PAM	Mourão	P.03, P.08
F	Mayet	P.34	J	Munhá	P.36
H	Mestre	P.35			

77

N

JV	Nabais	O.06, P.05, P.06, P.07, P.09, P.10	AS	Nunes	P.01
-----------	---------------	---------------------------------------	-----------	--------------	------

O

M	Oliveira	O.07	MJ	Oliveira	P.32
----------	-----------------	------	-----------	-----------------	------

P

A	Pereira	P.23	S	Pinheiro	P.05
AM	Pereira	P.16, P.17	AP	Pinto	P.24
C	Pin	P.36	T	Pires	P.24
M	Pinheiro	P.28	DS	Pito	P.15

R

JPP	Ramalho	P.19, P.20	S	Román	O.06, P.07
P	Ramos	P.25, P.26	C	Romão	PC.01
RS	Ribeiro	O.09	L	Rosado	P.33, P.34
MML	Ribeiro Carrott	O.01, O.06, P.01, P.02, P.03, P.04, P.05, P.06, P.08 P.09	PA	Russo	O.01, P.02, P.08

78

S

C	Salvador	O.09, P.27	F	Sezões	P.08
S	Salvador	P.35	C	Silva	PC.04
J	Sampaio	O.09	JRM	Silva	P.23
AM	Santos	P.11	M	Silva	P.24
JL	Santos	P.25	O	Silva	O.10
PD	Santos	P.18	TJL	Silva	P.11, P.12, P.14
N	Schiavon	O.07	C	Sousa	P.31
C	Serrano	P.13			
C	Serrano	P.24			

T

D	Tavares	P.34	FC	Teixeira	P.22
H	Tenda	P.28	JMG	Teixeira	P.16, P.21
APS	Teixeira	P.22	L	Tobias	P.35
DM	Teixeira	P.21, P.24, P.26, P.35			

V

S	Valadas	O.07, P.32, P.33	Z	Velez	P.25, P.26,
M	Valente	P.38	HM	Vicente	O.05, O.08, O.11
A	Veiga	P.21			

