



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

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

3

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

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

P.31	C. Sousa, M.R. Moita, A.T. Caldeira, M.R. Martins, M. Gil, J. Mirão, A. Candeias <i>Biotecnologia 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 Pannel 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*

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