

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
ESCOLA DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
UNIVERSIDADE DE ÉVORA

**JORNADAS 2010
DO DEPARTAMENTO DE
QUÍMICA**

25 e 26 de Março de 2010

COMISSÃO ORGANIZADORA

Júlio Cruz Morais

João Valente Nabais

António Candeias

António Teixeira

Cristina Galacho

Jorge Teixeira

APOIOS

Universidade de Évora

Escola de Ciências e Tecnologia da Universidade de Évora

Delta Cafés

Título: Jornadas 2010 do Departamento de Química.

Editores: Júlio Cruz Morais, João Valente Nabais, António Candeias, António Teixeira, Cristina Galacho e Jorge Teixeira.

Impressão: FLM, Fundação Luís de Molina.

Local, Ano de Publicação: Évora, 2010.

Tiragem: 50 exemplares.

INTRODUÇÃO

Júlio Cruz Morais

Director do Departamento de Química

No seguimento da recente reestruturação da Universidade de Évora, consubstanciada pela entrada em vigor dos seus novos estatutos, coloca-se a toda a academia, em geral, e aos departamentos, em particular, uma imensa diversidade de desafios, que a todos exige grande determinação para os enfrentar e vencer. Na realidade, para além dos problemas decorrentes dos novos paradigmas do ensino superior que conduziram à recente reforma dos ensinos por força do chamado Processo de Bolonha e dos decorrentes da profunda crise financeira que tem condicionado a capacidade de acção dos departamentos, vivemos agora uma profunda mudança de modelo organizativo da Universidade de Évora que veio alterar, nalguns aspectos drasticamente, as competências dos departamentos, afastando-os dos centros de decisão internos, retirando-lhes competências nos planos científico e pedagógico, nos ensinos e na investigação, e deixando-os à míngua no plano financeiro.

Apesar destas dificuldades, o Departamento de Química da Universidade de Évora tem-se empenhado com grande afinco e motivação na procura de novos caminhos, implementando medidas de rigor em todas as vertentes da sua acção. Nomeadamente, nos ensinos em que tem responsabilidades, a nível de 1º, 2º ou 3º Ciclos; na investigação conduzida pelos seus membros; no acompanhamento e apoio dos alunos; na inserção destes na investigação; na procura de novos públicos e no ensino à distância e em iniciativas de divulgação da ciência e da tecnologia. Procurando contribuir, deste modo, no âmbito da diversidade das suas atribuições em química e engenharia química, bioquímica e biotecnologia, para promover a excelência da Universidade de Évora e aumentar a sua competitividade e atractividade face à concorrência.

Neste momento em que um novo reitor inicia o seu mandato é um momento oportuno para uma reflexão sobre os caminhos do futuro, o Departamento de Química da Universidade de Évora, no seguimento de iniciativas anteriores, realiza as suas Jornadas 2010, em 25 e 26 de Março, nas quais se propõe dinamizar um amplo debate, tendo em vista perspectivar o futuro papel do Departamento de Química na Universidade de Évora, enquanto membro da Escola de Ciências e Tecnologia, e aquilo que dele se espera face aos desafios que se colocam interna e externamente à Universidade de Évora.

Neste sentido, estas Jornadas 2010 iniciar-se-ão com uma mesa redonda subordinada ao tema "O Departamento de Química – presente e futuro no novo quadro institucional da Universidade de Évora". Nas sessões seguintes, enquadradas por investigadores convidados de instituições com as quais o Departamento tem colaborações, participarão docentes, alunos de cursos de 1º, 2º ou 3º Ciclos dinamizados pelo Departamento, estagiários e bolseiros, os quais apresentarão comunicações e trabalhos em que se encontram envolvidos, a decorrer nos laboratórios do Departamento, dos quais adiante se apresentam os resumos.

ÍNDICE

Introdução	1
Índice	3
Programa	9
 Palestras Convidadas	
PC.01 AJF González, CM González-García, M. Calderón, S. Román, B Ledesma, MC Rayo, G. Engo, A Gómez-Landero <i>Escuela de Ingenierías Industriales, Universidad de Extremadura</i> Investigación del Grupo GAIRBER	15
PC.02 RA Monteiro <i>KEMET Portugal</i> DESAFIOS da Indústria de condensadores de Ta	16
PC.03 N Lima, MF Simões, C Santos <i>Micoteca da Universidade do Minho, IBB/Centro de Engenharia Biológica, Braga</i> Centros de Recursos Biológicos: Novas exigências e oportunidades para a bioeconomia	17
PC.04 C Santos, N Lima <i>Micoteca da Universidade do Minho, IBB/Centro de Engenharia Biológica, Braga</i> A Espectrometria de Massa pela Técnica de MALDI-TOF ICMS na Identificação Microbiana	18
 Comunicações Orais	
O.01 MML Ribeiro Carrott, C Galacho, PA Russo, PAM Mourão, PJM Carrott Materiais Mesoporosos Ordenados: O Papel da Química de Superfícies no seu Desenvolvimento e Propriedades	21
O.02 JMG Teixeira A Electroquímica no nosso Departamento: Presente e Futuro	22
O.03 AF Bella, AJ Burke Síntese Orgânica como uma Ferramenta para Resolver Problemas em Sistemas Biológicos	23

O.04	CM Antunes <i>Projectos e linhas de investigação no âmbito da Bioquímica aplicada às ciências da saúde</i>	24
O.05	H Vicente <i>Utilização de Técnicas de Data Mining na Resolução de Problemas no Âmbito da Química</i>	25
O.06a	M Figueiredo, MF Paixão, A Vázquez <i>PIEARCTS: Proyecto Iberoamericano de Evaluación de Actitudes Relacionadas con la Ciencia, la Tecnología y la Sociedad</i>	26
O.06b	M Figueiredo <i>O Ensino e a Aprendizagem da Química: Contributos para a Avaliação de Diferentes Abordagens</i>	27
O.07	JV Nabais, C Laginhas, P Carrott, MR Carrott, Shuas, PAM Mourão <i>Preparação, caracterização e estudo de aplicações para materiais de carbono preparados a partir de precursores naturais</i>	28
O.08	A Candeias, C Dias, T Ferreira, S Valadas, J Mirão, D Teixeira, J Caetano, L Carvalho, A Guilherme, S Pessanha <i>Cultural Scene Investigation – episode 1: The case of Josefa and Baltazar... and the painted Royal Medallions</i>	29
O.09	PJ Mendes <i>Compostos organometálicos com propriedades de óptica não linear comutáveis</i>	30
O.10	MR Martins, J Cruz Morais <i>Caracterização química e actividade biológica de plantas aromáticas do Alentejo</i>	31
O.11	R Ferreira, I Alves-Pereira <i>Stress and Metabolic Regulation (SMR)</i>	32
O.12	AR Costa, CM Antunes, J Cruz Morais <i>Alterações na modulação da Na,K-ATPase pela glicose em célula β-pancreática de animais intolerantes à glicose</i>	33
O.13	PJM Carrott, JV Nabais, IPP Cansado, PAM Mourão, Suhas, FL Conceição, LM Marques, MML Ribeiro Carrott <i>Adsorção e Novos Materiais de Carbono para a Redução de Emissões e a Captura de Dióxido de Carbono</i>	34
O.14	JM Arteiro <i>Optimização de culturas aeróbias e anaeróbias de microrganismos e produção de compostos com valor acrescentado a partir de resíduos agro-industriais</i>	35

O.15	ME Lopes <i>Perspectivas de investigação na área do ambiente e do património</i>	36
O.16	C Salvador, MR Martins, F Pinto, JM Arteiro, AT Caldeira <i>Biomarcadores moleculares e perfil inorgânico na caracterização de estirpes de cogumelos silvestres <u>Amanita ponderosa</u></i>	37
O.17	TJL Silva, PJ Mendes <i>Complexos Organometálicos de Ruténio(II) para Óptica não Linear</i>	38

Comunicações em Pannel

P.01	A. Nunes, C Galacho, IPP Cansado, MML Ribeiro Carrott, PJM Carrott <i>Adsorção de poluentes orgânicos em carvões activados e materiais mesoporosos ordenados</i>	41
P.02	F Velho, C Galacho, MML Ribeiro Carrott, PJM Carrott <i>Materiais do tipo SBA-15 contendo titânio: Síntese, caracterização e avaliação da estabilidade hidrotérmica</i>	42
P.03	C Herdes, J Robalo, PAM Mourão, M Carrott, P Carrott <i>Desenho assistido por computador de catalisadores biomiméticos</i>	43
P.04	LM Marques, FL Conceição, MML Ribeiro Carrott, PJM Carrott <i>Diffusion of Gases in Metal Containing Carbon Aerogels</i>	44
P.05	PAM Mourão, PJM Carrott, MML Ribeiro Carrott <i>Desperdícios de Cortiça – Processos de Activação – Efeitos na Capacidade de Adsorção</i>	45
P.06	JV Nabais, C Laginhas, P Carrott, MR Carrott, A Ramires <i>Despoluição de águas por remoção de mercúrio através de carvões activados</i>	46
P.07	DS Pito, P. Ferreira, CS Caetano, JE Castanheiro <i>Valorização de matéria-prima renovável com catalisadores heterogéneos</i>	47
P.08	TJL Silva; PJ. Mendes <i>Síntese de Complexos de Ru(II) e Fe(II) contendo benzo[c]tiofeno com aplicações em óptica não linear</i>	48
P.09	SM Martins, AM Pereira <i>Nova Metodologia para a Síntese de Coumarinas 3-Substituídas através de Reacções de Heck</i>	49
P.10	SM Martins, GS Palmeiro, AM Pereira <i>Síntese de Coumarinas com Potencial Actividade Antioxidante</i>	50

P.11	GS Palmeiro, AM Pereira <i>Avaliação de Coumarinas como Potenciais Sondas Químicas para Detecção de Iões Metálicos</i>	51
P.12	C Ramos, V Paixão, AT Caldeira, MR Martins, S Valadas, J. Mirão, M. Gil, A. Candeias <i>Estudos de biodeterioração e análise cromática dos frescos renascentistas da Ermida de Santo Aleixo (Montemor-o-Novo)</i>	52
P.13	J Mirao, N Schiavon, T Ferreira, C Dias, D Teixeira, A Carneiro, MC Lopes, T Calligaro, R Simon, A Candeias <i>Estudo comparativo de vidros arqueológicos romanos por Sync-μ-XRF confocal, PIXE/PIGE externo e VP-MEV-EDS</i>	53
P.14	A Candeias, S Valadas, P Adriano, A Santos Silva, R Veiga, J Mirão <i>Argamassas antigas: conservação, restauro, história e tecnologia</i>	54
P.15	A Manhita, V Santos, H Vargas, I Ribeiro, A Candeias, D Teixeira, T Ferreira, CB Dias <i>Estudos de envelhecimento artificial de lã tingida com garança, um corante natural vermelho</i>	55
P.16	S Arantes, MR Martins, M. Pereira, J Cruz Morais <i>Actividade antimicrobiana e antioxidante do óleo essencial de <u>Lavandula luisieri</u> (Rozeira) Rivas Martínez</i>	56
P.17	R Ribeiro, CM Antunes, R Brandão <i>Estudo para o desenvolvimento de métodos para quantificação de <u>Phl p5</u> em amostras de ar exterior colhidas na cidade de Évora</i>	57
P.18	R Ferro, CM Antunes, R Brandão <i>Estudo para o desenvolvimento de métodos para quantificação de <u>Ole e1</u> em amostras de ar exterior colhidas na cidade de Évora</i>	58
P.19	IP Vieira, AC Costa, DM Teixeira, CM. Antunes, J Cruz Morais <i>Efeito Hipoglicemiante de um Extracto Aquoso de <u>Cytisus multiflorus</u></i>	59
P.20	I Alves-Pereira, A Pereira, C Antunes, E Vieira, J Capela-Pires, M Pinheiro, A Conim, C Rosado, M Candeias, P Ruivo, S Gonçalves e R Ferreira <i>Aproximações experimentais ao stresse e regulação metabólica</i>	60
P.21	A Terrasso, MR Martins, C Salvador, J Sampaio, MF Candeias, JS Arteiro, AT Caldeira <i>Actividade biológica de complexos proteína-polissacárido produzidos em culturas de <u>Pleurotus ostreatus</u> utilizando resíduos de girassol</i>	61
P.22	JM Arteiro, C Salvador, I Figueiredo, R Vieira, MR Martins, AT Caldeira <i>Produção e purificação de Amidases por uma estirpe mutante de <u>Pseudomonas aeruginosa</u></i>	62

P.23	C Salvador, AT Caldeira, A Terrasso, MF Candeias, R Ribeiro, JS Arteiro, MR Martins <i>Propriedades antioxidantes de complexos proteína-polissacárido produzidos em culturas de <u>Coriolus versicolor</u></i>	63
P.24	F Costa, A Guerra, P Ramos, Z Velez, O Guerreiro, T Silva, AT Caldeira, M Duarte <i>Efeito dos extractos de <u>Cynara cardunculus</u> na regulação do ciclo celular, no processo de hepatocarcinogenese</i>	64
P.25	A Guerra, F Costa, P Ramos, Z Velez, O Guerreiro, AT Caldeira, MR Martins, M Duarte <i>Caracterização molecular da actividade de extractos de <u>Cynara cardunculus</u> na via de sinalização do PI3K/AKT/mTOR utilizando um modelo <u>in vitro</u> de hepatocarcinogénese</i>	65
P.26	SAC Sengo, MC Fernandes, AT Caldeira, PM Lourenço <i>Valorização da biomassa lenhocelulósica: Estudos de sacarificação enzimática de resíduos de polpa de azeitona</i>	66
P.27	A Catarina, J Arteiro, AT Caldeira <i>Valorização biotecnológica de águas ruças em culturas de <u>Lentinula edodes</u></i>	67
P.28	G Matias, FC Teixeira, MR Martins, AT Caldeira, APS Teixeira <i>Bisfosfonatos Derivados do Indazole: Síntese e Avaliação da Actividade Biológica</i>	68
P.29	A Silveira, AT Caldeira, APS Teixeira <i>Actividade Biocida do Óxido de Etileno em Dispositivos Médicos</i>	69
P.30	LC Dias, D Martins Teixeira, AT Caldeira <i>Produção de antibióticos lipopeptídicos por <u>Bacillus spp.</u></i>	70
P.31	EC Mestrinho, L Dias, Z Lopes da Silva, AP Carvalho, DM Teixeira, AV Dordio, AP Pinto <i>Avaliação da capacidade de depuração de efluentes agrícolas por um sistema biológico</i>	71
P.32	AP Pinto, AV Dordio, AP Carvalho, DM Teixeira <i>A poluição de águas e solos por poluentes orgânicos. Um problema actual</i>	72
P.33	CM Correia, MC Silva, EC Mestrinho, Z Lopes da Silva, AP Carvalho, AP Pinto, DM Teixeira, AV Dordio <i>Remoção de Fármacos de águas contaminadas com Leitos Construídos de Macrófitas</i>	73
P.34	PA Russo, MML Ribeiro Carrott, PJM Carrott <i>Condensação e Evaporação Capilar de Vapores Orgânicos em Materiais Mesoporos Ordenados</i>	74

P.35	AJ Burke, VR Marinho, EP Carreiro, CS Marques, PC Barrulas, NC Mota, IE Drumond, L Fernandes <i>Vias de Síntese de Novas Moléculas e Exploração de Reacções Catalíticas Assimétricas</i>	75
P.36	JC Ponte-e-Sousa, AM Neto-Vaz <i>Lead in Cork</i>	76
	Índice de Autores	77

PROGRAMA

25 Março

10:00 – 10:15 Sessão de abertura.

10:15 – 12:30 Mesa Redonda: **“Departamento de Química: Presente e Futuro no Novo Quadro Institucional da Universidade de Évora”**

Debate com a presença de várias entidades da Universidade de Évora.

14:00 – 15:30 Apresentações Orais.

O.01. MML Ribeiro Carrott, C Galacho, PA Russo, PAM Mourão, PJM Carrott: **Materiais Mesoporosos Ordenados: O Papel da Química de Superfícies no seu Desenvolvimento e Propriedades.**

O.02. JMG Teixeira: **A Electroquímica no nosso Departamento: Presente e Futuro.**

O.03. AF Bella, AJ Burke: **Síntese Orgânica como uma Ferramenta para Resolver Problemas em Sistemas Biológicos.**

O.04. CM Antunes: **Projectos e linhas de investigação no âmbito da Bioquímica aplicada às ciências da saúde.**

O.05 H Vicente: **Utilização de Técnicas de *Data Mining* na Resolução de Problemas no Âmbito da Química.**

O.06a M Figueiredo, MF Paixão, A Vázquez: **PIEARCTS: Proyecto Iberoamericano de Evaluación de Actitudes Relacionadas con la Ciencia, la Tecnología y la Sociedad.**

O.06b. M Figueiredo: **O Ensino e a Aprendizagem da Química: Contributos para a Avaliação de Diferentes Abordagens.**

15:30 – 16:00 Palestra convidada.

PC.01. AJF González, CM González-García, M. Calderón, S. Román, B Ledesma, MC Rayo, G. Engo, A Gómez-Landero, *Escuela de Ingenierías Industriales, Universidad de Extremadura*: **Investigación del Grupo GAIRBER.**

16:00 – 17:00 Apresentações em Painel e *coffee break*.

26 Março

10:00 – 10:45 Palestra convidada.

PC.02. RA Monteiro, *KEMET Portugal*: **Desafios da Indústria de condensadores de Ta.**

10:45 - 11:00 *Coffee break*

11:00 – 12:30 Apresentações Orais.

O.07. JV Nabais, C Laginhas, P Carrott, MR Carrott, Shuas, PAM Mourão: **Preparação, caracterização e estudo de aplicações para materiais de carbono preparados a partir de precursores naturais.**

O.08. A Candeias, C Dias, T Ferreira, S Valadas, J Mirão, DM Teixeira, J Caetano, L Carvalho, A Guilherme, S Pessanha: **Cultural Scene Investigation – episode 1: The case of Josefa and Baltazar... and the painted Royal Medallions.**

O.09. PJ Mendes: **Compostos organometálicos com propriedades de óptica não linear comutáveis.**

O.10. MR Martins, J Cruz Morais: **Caracterização química e actividade biológica de plantas aromáticas do Alentejo.**

O.11. R Ferreira, I Alves-Pereira: ***Stress and Metabolic Regulation (SMR).***

O.12. AR Costa, CM Antunes e J Cruz Morais: **Alterações na modulação da Na,K-ATPase pela glicose em célula β -pancreática de animais intolerantes à glicose.**

14:00 – 14:45 Palestras Convidadas.

PC.03. N Lima, MF Simões, C Santos, *Micoteca da Universidade do Minho, IBB/Centro de Engenharia Biológica, Braga*: **Centros de Recursos Biológicos: Novas exigências e oportunidades para a bioeconomia.**

PC.04. C Santos, N Lima, *Micoteca da Universidade do Minho, IBB/Centro de Engenharia Biológica, Braga*: **A Espectrometria de Massa pela Técnica de MALDI-TOF ICMS na Identificação Microbiana.**

14:45 – 16:00 Apresentações Orais.

O.13. PJM Carrott, JV Nabais, IPP Cansado, PAM Mourão, Suhas, FL Conceição, LM Marques, MML Ribeiro Carrott: **Adsorção e Novos Materiais de Carbono para a Redução de Emissões e a Captura de Dióxido de Carbono**

O.14. JM Arteiro: **Optimização de culturas aeróbias e anaeróbias de microrganismos e produção de compostos com valor acrescentado a partir de resíduos agro-industriais.**

O.15. ME Lopes: **Perspectivas de investigação na área do ambiente e do património.**

O.16. C Salvador, MR Martins, F Pinto, JM Arteiro, AT Caldeira: **Biomarcadores moleculares e perfil inorgânico na caracterização de estirpes de cogumelos silvestres *Amanita ponderosa*.**

O.17. TJJ Silva, PJ Mendes: **Complexos Organometálicos de Rutenio(II) para Óptica não Linear.**

16:00 – 17:00 Apresentações em Painel e *coffee break*.

17:00 - 17:10. Sessão de Encerramento.

PALESTRAS CONVIDADAS

Investigación del Grupo GAIRBER

AJF González, CM González-García, M. Calderón, S. Román, B Ledesma, MC Rayo,
G. Engo, A Gómez-Landero

*Escuela de Ingenierías Industriales, Universidad de Extremadura, Avda. Elvas s/n, 06071
BADAJOZ, jfelixgg@unex.es, Tfno: 924-289619, Fax: 924-289601*

Se presentan las líneas de investigación que el Grupo GAIRBER (Grupo de Aprovechamiento Integral de Residuos Biomásicos, Energías Renovables) de la Universidad de Extremadura desarrolla, así como estudios actuales relacionados con las mismas y resultados obtenidos.

Las líneas que nuestro grupo desarrolla se encuentran incluidas dentro del campo de las Energías Renovables, estas son:

- Aprovechamiento energético de residuos biomásicos
- Obtención de biocombustibles: biodiesel, bioetanol, biogas y bioaceites.
- Preparación y caracterización de carbones activados.
- Aprovechamiento térmico y fotovoltaico de la energía solar.
- Cultivos agroenergéticos.
- Obtención de hidrógeno y almacenamiento en materiales adsorbentes.

Se abordarán los estudios relacionados con las anteriores líneas, así como se describirán las diferentes tecnologías de que dispone el grupo.

Se expondrá la importancia de llevar a cabo una investigación aplicada, lo que supone realizar estudios que interesen a empresas y participar en proyectos de forma conjunta. En época de crisis energética es muy importante la transferencia de resultados a Entidades para su posterior explotación.

DESAFIOS da Indústria de condensadores de Ta

RA Monteiro

KEMET Portugal, P.Engineering Manager,

ruimonteiro@kemet.com

Introdução ao grupo KEMET e suas vertentes tecnológicas. Abordagem ao condensador de tântalo com base de construção SMD, focando os processos de fabrico da indústria de condensadores de Évora. Principais desafios desta indústria, consequência da miniaturização da indústria electrónica e descentralização da produção com vista à redução de custos. Desafios actuais, os quais obrigam à definição de soluções inovadoras que permitam aumentar a eficiência volumétrica destes componentes, assim como a elevada fiabilidade destes componentes. Tendo como base a estrutura de um condensador, ânodo e cátodo separados através de uma distância d por um dieléctrico, o aumento da capacidade e voltagem deste componente para um determinado volume passa pela redução da espessura de dieléctrico mantendo a estabilidade eléctrica, o aumento da eficiência associada à impregnação do corpo poroso (ânodo de Ta) e/ou o aumento da eficiência volumétrica no processo de construção do “package SMD”. Alguns dos factores em estudo com elevada relevância nos desafios desta indústria, são:

- Pós de tântalo: forma das partículas, distribuição (PSD), fornecimento;
- Estabilidade do ânodo: Distribuição de densidade de prensagem homogénea;
- Sinterização de pós de elevado CV (estabilidade das ligações, níveis de oxigénio elevados);
- Formação do dieléctrico: Métodos alternativos de formação diferenciada;
- Impregnação com MnO_2 : Recurso a surfactantes, electrowetting, ...
- Impregnação com Polímero condutor: Estabilidade (temperatura, voltagens elevadas), ligação das várias camadas e cobertura externa;
- Camadas de contacto: Estabilidade em temperatura, humidade; Implementação de materiais economicamente mais eficientes;
- Package SMD: minimização de “vazios”, assegurando a estabilidade, condutividade eléctrica, resistência a factores externos e eficiência económica.

Centros de Recursos Biológicos: Novas exigências e oportunidades para a bioeconomia

N Lima, MF Simões, C Santos

*Micoteca da Universidade do Minho, IBB/Centro de Engenharia Biológica, Braga
nelson@ie.uminho.pt*

Desde 1982 que as colecções de culturas microbianas trabalham em conjunto para implementarem uma política comum, partilharem tecnologias e procurarem projectos colaborativos. Adicionalmente, o Grupo de Trabalho em Biotecnologia da Organização para a Cooperação e o Desenvolvimento Económico (OCDE) tem defendido os centros de recursos biológicos (CRBs) como elementos chave na infra-estrutura científica e tecnológica das ciências da vida e biotecnologia. A OCDE, em 2001, publicou um relatório que enfatiza o potencial dos CRBs onde recomenda a criação de uma rede global de CRBs. Na segunda fase desta iniciativa, a OCDE encarregou um grupo de missão com a tarefa de desenvolver um plano de implementação das recomendações enunciadas no relatório. Isto incluiu, (i) normas de funcionamento comum, (ii) normas para ligação e trocas de informação, (iii) acções apropriadas para a segurança, (iv) regulação sobre a gestão da arquitectura institucional e (v) financiamento. Após este trabalho terminado, em 2009 lançou-se o projecto demonstrativo da rede global de CRBs (GBRCN, www.gbrcn.org). Este projeto conta com 15 países e trabalha para aumentar a eficiência das colecções microbianas com vista a garantir padrões de qualidade adequados para que as colecções possam trabalhar em rede. Adicionalmente, a Comissão Europeia apostou no financiamento do projecto europeu do consórcio de centros de recursos microbianos (EMbaRC, www.embarc.eu) como forma de fortalecer a Europa para a bioeconomia e a competitividade. Nesta sequência de esforços e exigências globais e europeias o fornecimento de material biológico de qualidade e com garantia de autenticidade passou a ser, concomitantemente, uma exigência central para as colecções. Em resposta a este contexto, a Micoteca da Universidade do Minho (MUM, www.micoteca.deb.uminho.pt) tem vindo a desenvolver critérios internos de gestão e a aplicar novas tecnologias de identificação, como é o caso do MALDI-TOF ICMS (*matrix-assisted laser desorption/ionisation time-of-flight intact cell mass spectrometry*), para garantir uma crescente qualidade e autenticidade dos recursos biológicos que preserva e fornece.

A Espectrometria de Massa pela Técnica de MALDI-TOF ICMS na Identificação Microbiana

C Santos, N Lima

Micoteca da Universidade do Minho, IBB/Centro de Engenharia Biológica, Braga
cl edir.santos@deb.uminho.pt

Matrix-Assisted Laser Desorption/Ionisation Time-Of-Flight Mass Spectrometry (MALDI-TOF MS) é uma técnica de massa de alta resolução largamente utilizada para analisar as massas moleculares dos compostos orgânicos. A análise das moléculas ocorre através de uma ionização suave. No processo de ionização, um feixe de laser de azoto (337 nm) incide sobre o analito recoberto por uma solução matriz, resultando numa fragmentação mínima das moléculas analisadas (Tanaka et al., 1988). A técnica de MALDI-TOF MS tem contribuído para um crescente aumento do conhecimento na identificação/caracterização microbiana. O MALDI-TOF IC (*Intact Cell*) MS gera espectros de massas de células intactas de microrganismos numa faixa de 2000-20000 Da. Os espectros gerados são obtidos como “impressões digitais” de um *taxon* específico (Santos et al., 2010). As vantagens desta nova abordagem, como um método de identificação e autenticação de estirpes microbianas, são: 1) curto período de tempo (minutos) utilizado no processo de preparação das amostras para análise; 2) a fiabilidade dos resultados obtidos e 3) os baixos custos das análises (basicamente esforço humano) (Santos et al., 2010). Neste trabalho pretende-se apresentar os últimos avanços da espectrometria de massa pela técnica de MALDI-TOF ICMS na identificação microbiana.

Referências

Tanaka, K., Waki, H., Ido, Y., Akita, S., Yoshida, Y., Yoshida, T. (1998). Protein and polymer analyses up to mlz 100 000 by laser ionization time-of-flight mass spectrometry. *Rapid Commun Mass Sp* 2, 151-153.

Santos, C., Paterson, R.M.R., Venâncio, A., Lima, N. (2010). Filamentous fungal characterisations by matrix-assisted laser desorption/ionisation time of flight mass spectrometry. *J Appl Microbiol* 108, 375–385.

COMUNICAÇÕES ORAIS

Materiais Mesoporosos Ordenados: O papel da Química de Superfícies no seu Desenvolvimento e Propriedades

MML Ribeiro Carrott, C Galacho, PA Russo, PAM Mourão, PJM Carrott

*Centro de Química de Évora e Departamento de Química, Universidade de Évora,
Colégio L. A. Verney, 7000-671 Évora, Portugal, manrc@uevora.pt*

Desde a sua criação na Universidade de Évora que o Grupo de Química de Superfícies e Materiais (GQSM), seguindo a especialização prévia dos seus promotores, tem a investigação centrada na área de materiais porosos principalmente em aspectos relacionados com a adsorção, a partir de fase gasosa ou líquida, e o desenvolvimento de novos materiais. Uma das classes de materiais objecto de investigação tem sido a de Materiais Mesoporosos Ordenados (MMO), englobando materiais de sílica (pura ou funcionalizada) e de carbono.

A descoberta das propriedades únicas dos primeiros membros (M41S) ocorreu em 1992 e despoletou enorme interesse na comunidade científica, a que o GQSM aderiu quase de imediato. O interesse destes materiais teve origem na inexistência, até essa altura, de materiais com mesoporos (2-50nm) uniformes, ao contrário do que já se verificava na gama de microporos (<2nm), por exemplo, com os zeólitos. Podemos afirmar que a família dos MMO é actualmente numerosa, mas potencialmente ainda incompleta, o que decorre da versatilidade da síntese. De facto, a formação destes materiais baseia-se num processo de moldagem à nanoescala, usando conceitos de química-física de superfícies, o que permite, consoante a natureza do agente estruturante e os parâmetros exactos de síntese, controlar geometria, dimensão, arranjo espacial e química superficial dos mesoporos e, conseqüentemente, propriedades adsortivas e catalíticas, entre outras.

Nesta comunicação, apresentar-se-á um resumo sobre aspectos de síntese e propriedades dos MMO, ilustrando com exemplos concretos de resultados de investigação realizada no GQSM, que incluirão: desenvolvimento e optimização de métodos de síntese e propriedades de metalossilicatos; estudos fundamentais de adsorção de vapores em novos materiais modelo, que validam ou questionam interpretações clássicas da adsorção; a função de peneiro molecular direccionada para moléculas de grandes dimensões (por ex. proteínas) em fase líquida.

Agradecimentos - Os autores agradecem o apoio financeiro da Fundação para a Ciência e a Tecnologia (projecto nº PTDC/CTM/67314/2006).

A Electroquímica no nosso Departamento: Presente e Futuro

JMG Teixeira

*Departamento de Química da Universidade de Évora & Centro de Química de Évora
R. Romão Ramalho, 59, 7000-671 Évora, jmgt@uevora.pt*

Nesta comunicação apresentam-se os trabalhos em curso e que se perspectivam realizar no nosso Departamento, na área da electroquímica. Entre os trabalhos de electroquímica em desenvolvimento, incluem-se vários trabalhos de investigação e alguns trabalhos no âmbito do Ensino da Química. Parte destes trabalhos é interdisciplinar com outras áreas e envolve a cooperação com outros colegas do Departamento. No entanto, também estão em curso outros trabalhos de electroquímica aplicada, em colaboração com investigadores de outras Instituições (Universidade da Madeira (UM) e Laboratório Nacional de Engenharia Civil (LNEC)), e em co-promoção com uma indústria local de componentes electrónicos (KEMET Electronics). Este último, no âmbito de um Projecto que foi financiado pelo QREN.

As principais actividades de investigação centram-se e centrar-se-ão: (1) No desenvolvimento e implementação de metodologias electroanalíticas aplicadas a problemas de monitorização ambiental (em especial, a detecção voltamétrica de urânio(VI)); (2) Na caracterização electroquímica de novos produtos (naturais ou sintéticos) e materiais; (3) No desenvolvimento de processos de controlo electroquímico (e.g., anodização metálica e migração electroquímica). Os vários trabalhos em realização nestes domínios, estão integrados em planos de Mestrado de Análises Químicas Ambientais e Engenharia Química.

Na vertente do ensino da Química, os trabalhos de electroquímica em progresso estão direccionados para o desenvolvimento de materiais didácticos de apoio para o professor do ensino Secundário. Os vários trabalhos neste domínio estão integrados em planos de Mestrado de Química em Contexto Escolar.

Síntese Orgânica como uma Ferramenta para Resolver Problemas em Sistemas Biológicos

AF Bella, AJ Burke

CQE, Universidade de Évora, Colégio Luís António Verney, 7000-671 Évora, Portugal;
abella@uevora.pt

O nosso objectivo é efectuar pesquisa em processos de síntese relevantes para problemas biológicos, assim como utilizar aplicações de proteómica para identificação e descoberta de novos fármacos¹. A nossa linha de investigação visa a criação de conhecimentos focados na optimização de estratégias para a obtenção, eficiente e a baixos custos, de moléculas biologicamente activas, assim como o desenvolvimento de protocolos superiores para criação de moléculas e métodos para aplicações biológicas. Por exemplo, análise funcional de "processamento elevado" (high-throughput) da actividade das proteínas em ambientes celulares para a capacidade de controlar e modificar actividades metabólicas *in vivo*.

O nosso programa inclui a utilização de uma gama de técnicas focadas no desenvolvimento de sistemas de entrega específica por forma a melhorar o transporte e "assimilação" a nível celular, de moléculas inibidoras, peptídeos, RNA e DNA.² Tencionamos desenvolver tecnologias utilizando bibliotecas de compostos envolvendo a avaliação de desempenho de "processamento elevado".

Os nossos estudos compreenderão ainda o desenvolvimento de protocolos para preparação de biomoléculas e sondas que possam ser utilizadas em reacções importantes para a indústria farmacêutica, com especial atenção à investigação com ligandos imobilizados especificamente projetados para isolamento e identificação de proteínas envolvidas em processos neoplásicos.³

Referências

1. Verhelst, S.H.L., and Bogyo, M. (2005). Chemical Proteomics Applied to Target Identification and Drug Discovery. *Biotechniques*, 38, 175-177.
2. Davis, M.E. Chen Zhuo and Dong M. Shin (2008). Nanoparticle therapeutics: an emerging treatment modality for cancer. *Nature Reviews- drug discovery*, 771-782.
3. Angela Nebbioso, Lucia Altucci et al. (2005). Tumor-selective action of HDAC inhibitors involves TRAIL induction in acute myeloid leukemia cells. *Nat Med*. Jan; 11(1):77-84.

Projectos e linhas de investigação no âmbito da Bioquímica aplicada às ciências da saúde

CM Antunes

Departamento de Química, Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas (ICAAM), Universidade de Évora, Largo dos Colegiais 2, 7000 Évora; Centro de Neurociências e Biologia Celular (CNC), Universidade de Coimbra, 3004-517 Coimbra, cmma@uevora.pt

A área da Bioquímica Clínica tem vindo a ser promovida na Universidade de Évora nos últimos anos. Actualmente são três as principais linhas de investigação em curso: i) uma linha de investigação com um âmbito fundamental na área da fisiopatologia da diabetes tipo 2, onde o principal objectivo consiste no estudo das bases bioquímicas subjacentes ao desenvolvimento desta patologia bem como da função das células secretoras de insulina como elemento central desta síndrome; e duas linhas com um âmbito mais aplicado ii) Selecção e caracterização de produtos provenientes de plantas com efeitos hipoglicemiantes; iii) A pesquisa de marcadores bioquímicos de fácil monitorização e/ou que permitam um diagnóstico precoce da doença, onde o estudo da composição da saliva está actualmente a ser iniciado.

Neste âmbito está actualmente aprovado um Projecto intitulado “Plantas mediterrânicas como fontes naturais de agentes anti-diabéticos: efeitos e mecanismos de acção no pâncreas e nas glândulas salivares” apoiado pelo ICAAM.

Tem vindo a trabalhar nestas linhas de investigação vários estudantes de Licenciatura, Mestrado e Doutoramento, que têm contribuído para a publicação de diversos trabalhos em congressos, bem como alguns Relatórios de Estágio em Bioquímica.

Temos ainda procurado estabelecer colaborações nacionais e internacionais. Neste âmbito está actualmente em curso um projecto europeu – HIALINE (EAHC, Ag nº 2008 11 07) – que visa o estabelecimento e certificação de métodos que permitam quantificar alergénios polínicos no ar exterior que possam vir a contribuir para a previsão mais apurada do risco alérgico para a população. Estão actualmente em curso duas teses de Mestrado de estudantes de Bioquímica no âmbito deste projecto.

Utilização de Técnicas de *Data Mining* na Resolução de Problemas no Âmbito da Química

H Vicente

*Escola de Ciências e Tecnologia, Departamento de Química e Centro de Química de Évora
Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho, 59, 7000-671 Évora, Portugal
hvicente@uevora.pt*

As técnicas de *Data Mining* visam a extracção de conhecimento a partir de bases de dados. Nesta apresentação pretende-se mostrar como esses métodos podem ser aplicados a problemas diversos no âmbito do domínio científico da Química. Dar-se-á particular atenção a alguns exemplos de aplicação, nomeadamente na área do Ambiente, referindo-se também outras aplicações em curso nas áreas da Biotecnologia e do Ensino.

PIEARCTS – Proyecto Iberoamericano de Evaluación de Actitudes Relacionadas con la Ciencia, la Tecnología y la Sociedad

[¹] M Figueiredo, [²] MF Paixão, [³] A Vázquez

[¹] *Departamento de Química da Universidade de Évora e Centro de Química de Évora*
mtf@uevora.pt

[²] *Instituto Politécnico de Castelo Branco e Centro de Investigação em Didáctica e
Tecnologia na Formação de Formadores (CIDTFF), Universidade de Aveiro*

[³] *Universidad de las Islas Baleares, Espanha*

O objectivo central do Projecto PIEARCTS é avaliar qual a educação científica dos estudantes e professores, detectar eventuais atitudes inadequadas sobre a natureza e o papel da Ciência e da Tecnologia, o modo como se inter-relacionam entre si e com a Sociedade.

O projecto foi financiado pelo Ministerio de Educación y Ciencia de España, (Proyecto de investigación SEJ2007-67090/EDUC) e Organización de Estados Iberoamericanos (OEI).

Enquanto investigação cooperativa internacional, tem por objectivo a obtenção de resultados em diferentes países iberoamericanos (Espanha, Brasil, México, Argentina, Panamá, Colombia e Portugal), que permitam obter conclusões mais amplas e sustentadas.

A metodologia seguida baseia-se na aplicação de questionários (disponíveis em duas formas complementares, F1 e F2, que integram um total de 30 questões sobre diferentes temáticas) e na utilização de métodos de análise inovadores. A construção desses questionários foi feita por um grupo de investigadores que integram o Projecto, tendo por base o “Cuestionario de Opiniones sobre la Ciencia, la Tecnología y la Sociedad” (COCTS). A aplicação dos questionários a três amostras distintas (estudantes a iniciar o Ensino Superior, estudantes a finalizar a sua formação e professores em exercício), nos diferentes países que participam no Projecto, tem permitido fazer estudos e obter conclusões relativamente a cada um dos temas em que estão organizadas as questões incluídas nos questionários: Definições, Sociologia Externa da Ciência, Sociologia Interna da Ciência e Epistemologia.

Nesta fase do projecto está ainda em curso a análise comparativa dos resultados globais obtidos em todos os países participantes, pelo que, nesta comunicação serão apenas apresentados alguns dos resultados obtidos em Portugal.

O Ensino e a Aprendizagem da Química: Contributos para a Avaliação de Diferentes Abordagens

M Figueiredo

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

mtf@uevora.pt

Na Sociedade dos tempos modernos é aceite de forma cada vez mais evidente e inequívoca a necessidade e a pertinência de uma Educação Científica para todos. Num contexto social onde cada vez mais se exige aos cidadãos que tomem decisões sobre assuntos relacionados com os avanços científicos e tecnológicos e com os impactos sociais e ambientais que eles representam, torna-se óbvia a necessidade de uma alfabetização científica, ou cultura científica, para todos. Em consequência dessa necessidade os currículos escolares estão hoje orientados para uma educação científica e tecnológica, visando a aquisição de atitudes científicas apropriadas pelos estudantes. Contudo, inúmeros estudos empíricos levados a cabo, desde a década de 70, no domínio da didáctica das ciências, têm revelado que estamos ainda longe de alcançar esses objectivos.

A eficácia da utilização de recursos didácticos diversificados e de estratégias inovadoras no Ensino nem sempre é objecto de avaliação, o que impede a obtenção de conclusões fundamentadas sobre as aprendizagens que de facto proporcionam e/ou sobre a motivação desencadeada nos estudantes relativamente ao estudo da Química.

A Linha de investigação que aqui se apresenta, encontra-se intimamente relacionada com alguns trabalhos que têm vindo a ser desenvolvidos no âmbito do Mestrado Química em Contexto Escolar, em que se pretende de alguma forma propor novas metodologias de Ensino e Aprendizagem, mas sobretudo avaliar qual o impacto da utilização de alguns recursos educativos como seja o Trabalho Experimental de diversa índole, o Quadro Interactivo, o Trabalho de Campo ou estratégias baseadas em abordagens do tipo Ciência-Tecnologia-Sociedade-Ambiente (CTSA).

Refere-se ainda uma vertente de investigação orientada para a avaliação das aprendizagens em Química em contextos educativos não-formais, cujo objectivo é rentabilizar o trabalho que se tem desenvolvido no âmbito da Linha 5 do Centro de Química de Évora – Ensino e Divulgação da Química.

Preparação, caracterização e estudo de aplicações para materiais de carbono preparados a partir de precursores naturais

JV Nabais, C Laginhas, P Carrott,

M Ribeiro Carrott, Shuas, PAM Mourão

Escola Ciências e Tecnologia, Dep Química, Centro de Química de Évora, jvn@uevora.pt

A produção de carvões activados é um tema bastante actual e com impacto crescente nas sociedades modernas por via de uma crescente e continuada preocupação com o meio ambiente, quer seja por via legislativa quer seja por pressão da opinião pública. Uma das áreas de estudo mais relevantes é a procura de precursores que sejam de custo moderado, fáceis de obter e de trabalhar, designadamente aproveitando alguns resíduos industriais e subprodutos agrícolas criando assim mais valias comerciais e a diminuição dos resíduos de várias actividades económicas. Os materiais lignocelulosicos têm vindo a ser utilizados para a produção industrial de carvões activados com especial incidência na madeira e casca de coco. É neste âmbito que o Grupo de Química de Superfícies e Materiais tem vindo a desenvolver uma intensa investigação na procura de novos precursores com elevado potencial para a produção de carvões activados e simultaneamente testar algumas aplicações, maioritariamente na despoluição de águas.

Dos materiais usados como precursores de realçar os subprodutos agrícolas: esparto, girassol, videira, kenaf, cortiça e casca de amêndoa; e os resíduos industriais: endocarpo de café cedido pela empresa Delta e lamas primárias de tratamento de efluentes cedidas pela empresa Portucel.

Os carvões activados produzidos são de natureza básica com a presença de vários grupos funcionais, tais como pironas, ácidos carboxílicos, quinonas, grupos hidroxilo (livre e fenol), lactonas, esteres e éter. Amostras seleccionadas foram testadas para remoção de compostos fenólicos e de mercúrio de soluções aquosas com excelentes resultados.

Agradecimentos – Os autores agradecem à Fundação para a Ciência e Tecnologia e ao European Regional Development Fund (FEDER) pelo apoio financeiro para a realização deste trabalho (Projecto PTDC/CTM/66552/2006).

Cultural Scene Investigation – episode 1:

The case of Josefa and Baltazar... and the painted Royal Medallions

A Candeias^{1,2,3}, C Dias^{1,3}, T Ferreira^{1,3}, S Valadas^{1,3}, J Mirão^{1,4}, D Teixeira^{1,5},
J Caetano^{1,6}, L Carvalho⁷, A Guilherme⁷, S Pessanha⁷

¹Laboratório HERCULES – Herança Cultural Estudos e Salvaguarda, Universidade de Évora

²Laboratório José de Figueiredo, Instituto dos Museus e Conservação

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

⁴Centro de Geofísica de Évora e Departamento de Geociências da Universidade de Évora

⁵ICAM e Departamento de Química da Universidade de Évora

⁶Museu de Évora, Instituto dos Museus e da Conservação

⁷Centro de Física Atómica da Universidade de Lisboa

9:15 AM, researchers from Evora and Lisbon Universities enter the *Cultural Scene* at Evora Museum. Lying in a desk, eight paintings, some signed others don't, and twenty 17th century copper painted medallions that belonged to the Portuguese Royal family.

Some questions arise from their heads: Did Josefa d'Óbidos and her father Baltazar shared the workshop, who painted the unsigned paintings, what pigments did each one used, was their painting technique different?

To answer their questions, *in-situ* X-ray fluorescence spectrometry is performed during 5 days on the 8 paintings giving important preliminary data. To further study the cultural evidences, a skilled conservator together with the Museum director takes some microsamples. With the microsamples, the researchers leave the cultural scene and continue their work at *HERCULES* and *José de Figueiredo* laboratories.

The samples are cut, polished and afterwards studied with a set of analytical techniques including optical microscopy, scanning electron microscopy coupled with energy dispersive X-ray spectrometry and micro-FTIR.

At the Labs, researchers start to have some answers to their original questions but others arise that cannot be answered without further study. The team seeks other laboratory infrastructures and ANKA synchrotron in Karlsruhe seems to be able to give complementary data. Some months later, after applying for beamtime, researchers fly to Karlsruhe and at ANKA use the confocal synchrotron micro-X-ray spectrometer of FLUO beamline. After arriving to Evora, researchers compile data and conclude that father and daughter have used the same type of pigments, the same type of binder but some differences were found...in preparation layers, in some pigments admixtures and...

...Oh, by the way, I almost forgot, the copper painted Royal Medallions... well, they were just beside the 8 paintings and were too good not to be studied. I can only say that the answers were found in the basement of the Louvre Museum, involved radioactive sources, particle accelerators and croissants, a lot of croissants...

Compostos organometálicos com propriedades de óptica não linear comutáveis

PJ Mendes

Centro de Química de Évora e Departamento de Química, Universidade de Évora

pjgm@uevora.pt

Os materiais possuindo propriedades ópticas não lineares de 2ª ordem (SONLO) comutáveis têm sido objecto de pesquisa devido às suas potenciais aplicações como nano-componentes na área do processamento digital e comunicações. Recentemente, notou-se que os compostos organometálicos ou de coordenação teriam potencialidades neste domínio [1,2]. Apesar destes compostos terem vindo a ser bastante estudados na área da óptica não linear, poucos estudos foram realizados com vista à sua potencial aplicação como comutadores moleculares com base nas suas propriedades de SONLO. A maior parte do estudo actual neste tipo de compostos é feito em sistemas dipolares tradicionais contendo: i) um centro metálico ligado a um sistema orgânico conjugado ou ii) sistemas bimetálicos homonucleares em que os centros metálicos são ligados pelo sistema orgânico conjugado através de grupos funcionais equivalentes.

Neste trabalho pretende-se apresentar as linhas gerais do projecto em que o autor está envolvido e que consiste na síntese, caracterização e estudo de novos compostos organometálicos, contendo cromóforos hiperpolarizáveis, com diferentes estruturas moleculares de forma a obter formas moleculares 'on' e 'off' adequadas para a comutação das propriedades de SONLO.

[1] B. J. Coe, Chem. Eur. J. 5 (1999) 2464-2471.

[2] I. Asselberghs, Koen Clays, Andre Persoons, Michael D. Ward, Jon McCleverty, J. Mater. Chem. 14 (2004) 2831-2839.

Caracterização química e actividade biológica de plantas aromáticas do Alentejo

MR Martins ^{1,2}, J Cruz Morais ^{1,2}

¹Departamento de Química, Universidade de Évora

²ICAAM, Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas

mrm@uevora.pt

As plantas aromáticas são cada vez mais usadas como agentes terapêuticos, cosméticos e aditivos alimentares, a par de produtos de síntese industrial, como no caso da medicação alopática convencional, ou mesmo como seus substitutos. Actualmente, estima-se que mais de 80% da população mundial recorre aos fitoprodutos para diversos fins. O crescente interesse pelo uso destes produtos justifica o aprofundamento do conhecimento científico a seu respeito, a par do saber e práticas tradicionais, de modo a permitir uma utilização adequada, eficaz e segura dos mesmos.

Os nossos estudos incluem pesquisa etnobotânica e etnofarmacológica e incidem essencialmente sobre a determinação da composição química e a avaliação da actividade biológica de óleos essenciais e extractos de plantas aromáticas da região do Alentejo. Neste âmbito, têm sido realizados diversos trabalhos sobre plantas nativas da região de Évora, nomeadamente, *Coriandrum sativum* L. (coentro), *Thymus mastichina* L. (tomilho vulgar) *Origanum virens* Hoffgg. et Link (orégão), *Foeniculum vulgare* Miller (funcho), *Mentha cervina* L. (hortelã da ribeira), *Mentha spicata* L. (hortelã-comum), *Rosmarinus officinalis* L. (alecrim), *Calamintha baetica* (erva das azeitonas) e *Schinus molle* L. (pimenteira rosa).

A análise da composição química dos óleos essenciais pode permitir também completar estudos taxonómicos para classificação de espécies e sub-espécies de plantas aromáticas. Neste sentido, está em curso um trabalho com diferentes estirpes de *Lavandula* spp. nativas da região Alentejo, com vista a esclarecer a sua classificação taxonómica e ainda conhecer algumas das suas actividades biológicas, numa perspectiva da sua valorização económica, não pondo em risco a sua preservação. Poder-se-ão ainda perspectivar estudos para produção biotecnológica de certos metabolitos biologicamente activos, a partir de plantas seleccionadas.

Nesta linha de trabalho têm sido realizados vários estágios da Licenciatura em Bioquímica da U. Évora, alguns dos quais presentemente em curso, e acolhidos bolseiros de Integração na Investigação no âmbito do ICAAM. Neste âmbito, têm também sido realizadas acções de divulgação e estágios incluídos no Programa “Ocupação Científica nas Férias - Jovens Ciência Viva nos Laboratórios”, destinadas a alunos do ensino secundário.

Stress and Metabolic Regulation (SMR)

R Ferreira, I Alves-Pereira

*Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora,
Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas (CTA-ICAAM), UÉvora
raf@uevora.pt*

A célula viva contém um conjunto elevado de micro e macro-moléculas cujos níveis intracelulares são finamente assegurados por diversos mecanismos moleculares que regulam alterações endógenas como o ciclo ou a diferenciação celular, mas também a resposta versátil a estímulos ambientais, como a disponibilidade de nutrientes, a presença de metais ou o contacto com compostos exógenos. Os organismos vivos expostos ao dióxigénio, produzem espécies reactivas (RS), subprodutos do seu metabolismo basal e/ou da resposta a agentes físico-químicos exógenos, geradores de stresse oxidativo. Em geral, as RS são poderosos agentes oxidantes que danificam todo o tipo de estruturas celulares, sendo na sua maioria radicais livres, que desencadeiam degenerescência celular, comprometem factores de regulação metabólica induzindo citotoxicidade. Neste contexto, surgiu a linha de investigação *Stress and Metabolic Regulation* que tem como principais objectivos avaliar a interferência de metais, nanomateriais, fitofármacos, e componentes nutricionais, no crescimento celular, metabolismo lipídico e esteroídico, resposta antioxidativa e/ou de biotransformação em eucariotas. Em simultâneo procura esclarecer respostas adaptativas de sobrevivência celular por eucariotas a esse tipo de agentes físico-químicos. Os conhecimentos adquiridos poderão ser aplicados à identificação de mecanismos reguladores do metabolismo endógeno e de resposta ao stresse que permitam caracterizar e compreender populações de leveduras e/ou de animais, detectar e controlar patologias clínicas, potenciar a utilização de leveduras vínicas nativas, na vinificação, depuração ambiental e detecção de contaminantes metálicos e/ou orgânicos em meios aquosos. Uma aposta recente procura também caracterizar a capacidade antioxidante de alguns alimentos, em particular frutos e carne, bem como, de produtos derivados, tendo em vista a optimização de processos de transformação e preservação. Estas actividades desenvolvem-se no Departamento de Química da Escola de Ciências e Tecnologia (ECT) e no Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas (CTA-ICAAM) da Universidade de Évora. A equipa residente constituída pelos autores, doutorado em Bioquímica e doutorada em Bioquímica y Biología Molecular y Genética, colabora com outros grupos de investigação do ICAAM, da Universidade do Minho e de outros Institutos nacionais, bem como, com o Grupo GENZIMA da Faculdade de Medicina da Universidade da Extremadura, Espanha. Neste momento integram também a equipa 3 estagiários da licenciatura em Bioquímica, 1 aluno de dissertação do Mestrado em Química em Contexto Escolar e 5 alunos de dissertação do Mestrado em Bioquímica. No período de 2005-2010, a actividade científica desta linha gerou 8 acções Ciência Viva, 8 relatórios de estágio em Bioquímica, 16 comunicações internacionais e 17 nacionais em painel, 2 comunicações orais por convite, uma em encontro nacional e outra internacional, bem como, 8 artigos com *peer review* em livro internacional (ISI), 2 artigos em revistas nacionais (SciELO) e 3 artigos em revistas internacionais (ISI).

Alterações na modulação da Na,K-ATPase pela glicose em célula β -pancreática de animais intolerantes à glicose

AR Costa^{1,2}, CM Antunes^{1,3}, J Cruz Morais^{1,2}

¹*Departamento de Química, ²Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas (ICAAM), Universidade de Évora, Largo dos Colegiais 2, 7000 Évora;* ³*Centro de Neurociências e Biologia Celular (CNC), Universidade de Coimbra, 3004-517 Coimbra; acrc@uevora.pt*

A diabetes tipo 2 é uma síndrome metabólica, que se caracteriza por alterações da secreção ou acção da insulina, cujas bases bioquímicas não estão completamente esclarecidas. Na célula- β , a resposta fisiológica à glicose envolve a despolarização, resultante principalmente do fecho de canais de K^+ sensíveis ao ATP, seguido do influxo de Ca^{2+} por canais sensíveis à voltagem tipo-L e consequente aumento da concentração intracelular de Ca^{2+} , necessário à exocitose da insulina, hormona responsável pela homeostasia da glicose.

A Na,K-ATPase (ou bomba de sódio) é o sistema de transporte activo responsável por manter o gradiente transmembranar de Na^+ e K^+ . Estudos recentes têm sugerido que a inibição da Na,K-ATPase poderá contribuir para a despolarização induzida por glicose.

Como o acoplamento estímulo-secreção se encontra alterado em célula- β de animais diabéticos, propoemo-nos estudar a participação da Na,K-ATPase neste mecanismo utilizando um modelo animal de pré-diabetes que se caracteriza essencialmente por apresentar alterações na curva de tolerância à glicose. Para isso, desenvolvemos um método que permite avaliar a actividade da bomba em células β -pancreáticas primárias, mantidas em culturas aderentes, que preservam os processos de transdução de sinal.

Com este método observámos que a glicose inibe a Na,K-ATPase em animais normais, estando este processo significativamente atenuado em animais pré-diabéticos. Observámos ainda que a secreção de insulina estimulada por glicose, nas células de pré-diabéticos, é cerca de 4 vezes menor relativamente aos controlos.

Estes dados permitem-nos sugerir que a regulação da bomba por glicose se encontra modificada em animais pré-diabéticos, podendo contribuir para as alterações dos mecanismos iónicos responsáveis pelo acoplamento estímulo-secreção, nomeadamente na cinética da despolarização, comprometendo a secreção de insulina.

O trabalho prossegue no sentido de esclarecer os mecanismos através dos quais a glicose induz inibição na Na,K-ATPase, bem como no levantamento dos factores que poderão contribuir para as diferenças observadas entre os animais normais e pré-diabéticos, nomeadamente ao nível da expressão isoenzimática

Adsorção e Novos Materiais de Carbono para a Redução de Emissões e a Captura de Dióxido de Carbono

PJM Carrott, JV Nabais, IPP Cansado, PAM Mourão, Suhas,

FL Conceição, LM Marques, MML Ribeiro Carrott

Centro de Química de Évora e Departamento de Química, Universidade de Évora,

Colégio Luís António Verney, 7000-671 Évora, Portugal, peter@uevora.pt

Uma das principais fontes de emissões de CO₂ é a queima de carvão ou gás natural em centrais termoeléctricas. Actualmente 3 soluções tecnológicas estão a ser contempladas para facilitar a captura deste CO₂ e todas dependem da separação eficiente de uma mistura de gases, nomeadamente, CO₂/N₂, CO₂/H₂ ou O₂/N₂. Adsorção em sólidos microporosos, como peneiros moleculares de carbono, é habitualmente utilizada para efectuar este tipo de separação. Ao longo dos anos o Grupo de Química de Superfícies e Materiais (GQSM) tem estudado a adsorção de gases e vapores em novos materiais adequados preparados a partir de polímeros sintéticos, como PAN, PET e PEEK e com modificação superficial por técnicas que incluem deposição química do vapor (CVD) e tratamento com microondas.

Uma alternativa é a adsorção directa do CO₂ em sólidos mesoporosos com elevadas áreas superficiais e funcionalizados com aminas. Materiais com as propriedades indicadas são os aerogéis de carbono que o GQSM tem vindo a estudar nos últimos anos. São preparados por polimerização sol-gel de formaldeído e resorcinol, por exemplo, seguido por secagem supercrítica e carbonização.

Outra fonte significativa de emissões de CO₂ é a queima de combustíveis em veículos e aviões e a única solução viável nestas situações é a captura remota. O método tecnológico tradicional recorre à absorção em aminas líquidas. Contudo, a fixação das aminas num suporte sólido, tal como um aerogel de carbono, trará várias vantagens. O montado de cortiça e as florestas de pinho e eucalipto também desempenham um papel importante e o GQSM tem trabalhado durante largos anos na valorização dos desperdícios das indústrias de cortiça e da pasta de papel.

Nesta comunicação, apresentar-se-á um resumo do problemática, bem como de algumas das iniciativas, tal como a Plataforma Tecnológica Nacional para o CO₂, em que a Universidade de Évora tem uma participação activa.

Agradecimentos - Os autores agradecem o apoio financeiro da Fundação para a Ciência e a Tecnologia (projecto nº PTDC/EQU/EQU/64842/2006).

Optimização de culturas aeróbias e anaeróbias de microrganismos e produção de compostos com valor acrescentado a partir de resíduos agro-industriais

JM Arteiro^{a,b}

^aDepartamento de Química, Universidade de Évora. ^b CQE, Centro de Química de Évora.

jmsa@uevora.pt

Na última década, a biotecnologia tem sido considerada a nível mundial como uma das áreas prioritárias de desenvolvimento, existindo já em Portugal um conjunto razoável de empresas. A via biotecnológica de produção de alguns bens está a tornar-se cada vez mais competitiva, sobretudo em áreas como a indústria farmacêutica, alimentar, agro-indústria, agro-química, e no controlo ambiental, sendo as empresas de base biotecnológica reconhecidas como pólos fundamentais de desenvolvimento sustentável.

A biotecnologia resulta da interacção da matemática, informática, química, física, bioquímica, ciências biológicas, engenharia química e bioeconomia. Assim sendo, o seu desenvolvimento quer a nível de formação de pessoal quer de aplicação industrial é muito exigente.

Neste âmbito temos desenvolvido algumas acções de investigação que exigem por parte de pessoal deste Departamento muito empenho e cujos trabalhos envolvem essencialmente duas vertentes: o tratamento de efluentes, nomeadamente por digestão anaeróbia, e a produção de produtos de valor acrescentado. Nos últimos cinco anos temos centrado mais a nossa investigação nesta última vertente da produção. Os trabalhos desenvolvidos abrangem a produção de xantano, a produção de antibióticos lipopéptidos, a produção de complexos antitumorais proteína-polissacáridos, a produção de enzimas (ex. amidase), a produção de frutooligossacáridos e de outros produtos de valor acrescentado. Nesta investigação efectuada e a desenvolver, utilizamos, preferencialmente como substrato, os resíduos agro-industriais.

Vamos prosseguir a nossa linha de trabalho utilizando culturas celulares, com o intuito de produzir compostos bioactivos de interesse industrial, nomeadamente com propriedades antitumorais e compostos que permitam reduzir a degradação biológica de monumentos. Está ainda nas nossas ambições aumentar a produtividade dos processos biotecnológicos por intermédio de desregulação ambiental ou por manipulações genéticas dos organismos.

Perspectivas de investigação na área do ambiente e do património

ME Lopes

Departamento de Química e Centro de Química de Évora, mel@uevora.pt

Faz-se uma apresentação e balanço de um ano de actividade de investigação no Centro de Ciências Moleculares e Materiais da FCUL (2008/2009). O trabalho desenvolveu-se em múltiplas frentes: por um lado seguiu-se uma linha de investigação experimental própria, contando com a colaboração dos investigadores e os meios do CCMM/FCUL (Ponto 1). Ao mesmo tempo foi dada colaboração nas linhas aí em curso (Pontos 2 e 3). Finalmente estabeleceu-se uma multiplicidade de contactos com vista a desenvolvimento de trabalho futuro (Ponto 4).

1) Síntese e electroquímica de niobatos

1a) Síntese de novas fases óxidos policristalinos por novos métodos de síntese: Foram ensaiadas novas composições do tipo $\text{Fe}(\text{Nb},\text{M})\text{O}_4$ com vista a dopagem electrónica ($\text{M}=\text{Ti}, \text{Zr}$) e por buracos ($\text{M}=\text{W}, \text{Mo}$), ao mesmo tempo que se desenvolveu pela primeira vez a síntese destes compostos por via citratos.

1b) Estudo das propriedades electroquímicas como ânodos para a evolução do oxigénio: Foram preparados eléctrodos com cinco composições químicas distintas e caracterizados do ponto de vista electroquímico, também pela primeira vez.

1c) Estudo estrutural das fases preparadas; o recurso à técnica de espectroscopia de Mossbauer em complemento da difracção de Raios X e do estudo das propriedades eléctricas permitiu retirar conclusões importantes do ponto de vista estrutural.

2) Electroquímica de perovesquitais; Preparação da eléctrodos e estudo estabilidade electroquímica.

3) Estudo argamassas antigas de igrejas de Lisboa (colaboração com LNEC).

4) Perspectivou-se colaboração com:

4a) UBI, CCMM/FCUL, ICAM/UE e FCT/UNL – Concretizada no projecto de recuperação de metais a partir de leixivados PTDC/AAC-AMB/103112/2008.

4b) CQ/FCUL e CCMM/FCUL – Preparação de materiais micro e nanoestruturados para retroextracção.

4c) CCMM/FCUL e INETI Lumiar – Nanotoxicidade de materiais.

Biomarcadores moleculares e perfil inorgânico na caracterização de estirpes de cogumelos silvestres *Amanita ponderosa*

C Salvador^a, MR Martins^{a,c}, F Pinto^a, JM Arteiro^{a,b}, AT Caldeira^{a,b},

^aDepartamento de Química, Universidade de Évora. ^b CQE, Centro de Química de Évora.

^c ICAAM, Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas.

katia_salvador@hotmail.com

Amanita ponderosa é uma espécie de cogumelos silvestres, comestíveis, com elevado potencial de exportação. Esta espécie cresce espontaneamente nalguns microclimas da Península Ibérica, devido às suas características mediterrânicas, nomeadamente no Alentejo e em Andaluzia. Devido à grande diversidade de cogumelos selvagens, é essencial ter a capacidade de diferenciar e identificar as várias espécies de cogumelos. Adicionalmente, a sua composição mineral e orgânica, depende da estirpe fúngica e do seu ecossistema.

O objectivo deste estudo foi determinar a composição inorgânica de estirpes de *A. ponderosa* e encontrar biomarcadores moleculares para caracterizar estes cogumelos. Este trabalho é uma nova abordagem para a espécie *A. ponderosa* de Portugal.

Os perfis moleculares de cogumelos seleccionados, oito Basidiomicetos (*A. ponderosa*, *P. ostreatus*, *L. deliciosus*) e uma estirpe de Ascomiceto (*Tuber* sp.), foram analisados por RAPD-PCR utilizando-se oito primers micosatélites e por MSP-PCR utilizando o primer M13, a fim de estabelecer diferentes *fingerprintings* genéticos, entre estirpes. A avaliação do grau de similaridade foi avaliada através da construção de árvores filogenéticas (UPGMA).

A composição inorgânica das estirpes de *A. ponderosa* foi determinada por espectrometria UV-Vis (P), por espectrometria de absorção atómica (Ca, Mg, Fe, Cu, Zn e Mn) e por fotometria de chama de emissão (Na e K). A análise de componentes principais (CPA) mostrou que os elementos inorgânicos das estirpes em estudo foram distribuídas entre três grupos diferentes, sendo Ca, Mg e Na os principais elementos que contribuíram para esse agrupamento.

Os resultados da análise molecular mostraram que foram estabelecidos diferentes padrões para cada um dos nove *primers* testados, gerando diferentes perfis moleculares para cada uma das estirpes estudadas. Os ensaios de RAPD produziram polimorfismos com fragmentos amplificados variando entre 0,2 a 2.8 kb. A amplificação com o primer M13 gerou um perfil com 9-19 bandas variando de 0,2 a 1,2 kb. Entre os primers de RAPD testados, o OPG2 e o OPF6 permitiram uma maior distinção entre *Basidiomicetes* e *Ascomicetes*, e maior diferenciação entre as estirpes de *A. ponderosa* recolhidas nos diferentes locais, no entanto, o grau de discriminação por meio de RAPD-PCR dependeu fortemente dos primers utilizados.

Os resultados mostraram que o local geográfico de recolha das amostras influencia o perfil de *fingerprint* de *A. ponderosa*. O MSP-PCR revelou-se como um método rápido para amplificar sequências de DNA polimórfico, com alta reprodutibilidade e similaridade, permitindo caracterizar o perfil genético dos cogumelos em estudo. Além disso, a análise por MSP-PCR permitiu distinguir diferentes genótipos de estirpes de *A. ponderosa*, permitindo agrupá-las de acordo com o local de origem.

Complexos Organometálicos de Ruténio(II) para Óptica Não Linear

TJL Silva, PJ Mendes

Centro de Química de Évora, Rua Romão Ramalho 59, 7000-671 Évora

tjsilva@fc.ul.pt, pjgm@uevora.pt

O desenvolvimento crescente das tecnologias que utilizam fótons na transmissão e armazenamento de informação levou a um aumento da procura de novos materiais com potencial aplicação em electro-óptica e óptica integrada. A óptica não linear (NLO) trata da interacção da matéria com feixes intensos de radiação, de forma a serem obtidos novos feixes cujas propriedades serão diferentes das propriedades do feixe incidente, nomeadamente a sua frequência, fase ou amplitude.^[1] Tal alteração é conseguida através da utilização de materiais hiperpolarizáveis, cuja estrutura deverá obedecer a um sistema conjugado π do tipo “push-pull”. Dentro destes sistemas, a família dos monociclopentadienilos metálicos, conjugados com derivados acetilénicos de tiofeno, tem provado ser uma das mais eficazes na geração de sinais de NLO, nomeadamente na geração de segundas harmónicas (SHG), uma vez que a linearidade do sistema e a versatilidade redox do metal de transição permite uma deslocalização electrónica acentuada, favoráveis aos fenómenos de SHG.^[2] Serão apresentadas as sínteses e caracterizações de compostos monociclopentadienilruténio(II), de formula geral $\eta^5\text{-CpRu(PP)-C}\equiv\text{C-(C}_4\text{H}_2\text{S)}_n\text{A}$ (Cp= C₅H₅; PP = DPPE, 2PPh₃; A =NO₂, CHO), desenvolvido no âmbito do mestrado em Química Aplicada. A caracterização espectroscópica foi correlacionada com estudos de DFT (*Density Functional Theory*), sendo comparados os resultados obtidos experimentalmente com resultados simulados. Os mesmos estudos permitiram obter os valores de hiperpolarizabilidade (β) para os compostos sintetizados, onde se provou a promissora utilização destes compostos para geração de sinais de NLO. Os resultados mostram a dependência β com a presença de diferentes fosfinas e grupos aceitadores bem como com a extensão do sistema conjugado.

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

[2] - Powel, C.; Humphrey, M.; *J. Coord. Chem. Rev.*, 248, 725-756, 2004; Mendes, P.; Carvalho, A. J. P.; Ramalho, J. P.; *Journ. Mol. Struct. (THEOCHEM)*, 900, 110-117, 2009

COMUNICAÇÕES EM PAINEL

Adsorção de poluentes orgânicos em carvões activados e materiais mesoporosos ordenados

A Nunes, C Galacho, IPP Cansado, MML Ribeiro Carrott, PJM Carrott
Centro de Química de Évora e Departamento de Química da Universidade de Évora
ippc@uevora.pt

A utilização benéfica de herbicidas na Agricultura Moderna é indiscutível. No entanto, a elevada toxicidade e a persistência dos mesmos nos alimentos, na água, no ar e nos solos, pode provocar graves problemas quer a nível ambiental quer a nível de saúde pública. A remoção dos referidos compostos de águas subterrâneas ou de superfície constitui um assunto de crucial importância. De entre todos os métodos empregues, a adsorção em materiais porosos é um dos mais utilizados. Os carvões activados, AC, com elevadas áreas superficiais, possibilidade de modificação textural e química e de regeneração constituem o grupo preferencial de adsorventes. Contudo as dimensões dos seus poros, na gama micro, confinam significativamente os poluentes a serem adsorvidos. Esta limitação pode ser colmatada por recurso a materiais mesoporosos ordenados, os quais também apresentam elevadas áreas superficiais, possibilidade de controlo das propriedades de adsorção por funcionalização e dimensionamento dos poros na gama meso.

Neste trabalho apresentam-se os estudos de adsorção em fase líquida do azul de metileno, MB, corante usado como referência, e, do ácido 4-cloro-2-metilfenoxiacético, MCPA, em AC e materiais mesoporosos do tipo MCM41 e SBA15.

O AC foi preparado usando o poli(tereftalato de etileno) [1] como precursor com recurso à activação química com o KOH, este foi posteriormente modificado por oxidação com HNO₃ e redução a elevada temperatura. Relativamente aos materiais mesoporos foram preparadas amostras constituídas unicamente por sílica e com titânio incorporado [2]. Os adsorventes foram caracterizados por adsorção de azoto a 77K, DRX, FTIR, AE e AQ.

Resultados preliminares demonstraram que o AC não modificado apresenta uma elevada capacidade de adsorção, ~1,2 mmol/g, para os poluentes em estudo.

[1] I.P.P. Cansado, M.M.L. Ribeiro Carrott, P.J.M. Carrott and P.A.M. Mourão, Materials Science Forum **587** (2008) p. 753.

[2] C. Galacho, M.M.L. Ribeiro Carrott and P.J.M. Carrott, Microporous and Mesoporous Materials, **100** (2007) p. 312.

Materiais do tipo SBA-15 contendo titânio: Síntese, caracterização e avaliação da estabilidade hidrotérmica

F Velho, C Galacho, MML Ribeiro Carrott, PJM Carrott

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

pcg@uevora.pt

A introdução de titânio em materiais mesoporosos com estrutura ordenada, do tipo SBA-15, perfila-se como sendo de grande interesse no âmbito da catálise heterogénea oxidativa dado que permite ampliar a gama de aplicabilidade a substratos de maiores dimensões, de reconhecida importância em Química Fina. Esta potencial aplicação implica que os referidos materiais exibam estabilidade estrutural, designadamente, estabilidade hidrotérmica, mecânica e térmica.

A preparação de materiais Ti-SBA15 com elevado teor de titânio, por incorporação directa do metal, têm-se revelado de difícil execução experimental. Tal deve-se ao facto da razão molar de síntese Si/Ti nem sempre corresponder ao valor final obtido nos materiais do Ti-SBA15. Estudos recentes [1], demonstraram que a influência dos parâmetros de síntese é crucial para a incorporação e dispersão do metal neste tipo de materiais. Por controlo rigoroso, da concentração do precursor de sílica, do pH, e, do tempo e da temperatura do tratamento hidrotérmico é possível obter materiais com elevado teor de Ti. No entanto, os mesmos exibem diâmetros de poro relativamente baixos (<6nm) e reduzida estabilidade hidrotérmica.

Neste trabalho apresentam-se os estudos de preparação, caracterização e estabilidade hidrotérmica de materiais Ti-SBA15. Para o efeito, desenvolveu-se um novo método de síntese, processo hidrotérmico por via directa, que permitiu a obtenção de materiais com elevado teor de Ti e de acordo com as razões molares de síntese, Si/Ti, pré-definidas. Os materiais foram caracterizados por DRX e adsorção de N₂ a 77K o que permitiu verificar que todas as amostras com razão molar Si/Ti ≥ 10 apresentam uma estrutura hexagonal mesoporosa, regular e uniforme.

Por outro lado, os ensaios de estabilidade hidrotérmica, realizados por imersão das amostras em água à temperatura de 373,15K e durante 24 horas, revelaram que os materiais em causa exibem uma boa estabilidade hidrotérmica.

Adicionalmente estudos preliminares demonstraram que os materiais preparados exibem actividade catalítica para a reacção de epoxidação do ciclo-hexeno.

[1] F. Bérubé, F. Kleitz and S. Kaliaguine: J. Phys. Chem. C Vol. 112 (2008) 14403.

Desenho assistido por computador de catalisadores biomiméticos

C Herdes, J Robalo, PAM Mourão, M Carrott, P Carrott

Departamento de Química, Centro de Química de Évora, Universidade de Évora.

cherdes@uevora.pt

O desenvolvimento de catalisadores desempenha um papel central na investigação química. Uma abordagem promissora na sua síntese é traduzir os princípios da catálise enzimática para a concepção de catalisadores fazendo uso da técnica de polímero impresso molecularmente, onde grupos funcionais de polímeros são geralmente vinculados, pela interação covalente ou não, a um análogo do estado de transição da molécula objectivo na reacção desejada. Este complexo é então co-polimerizado pela iniciação radical na presença de uma grande quantidade de agente de reticulação e uma certa quantidade de um solvente inerte. Após a remoção da molécula objectivo, uma marca, contendo grupos funcionais em uma determinada orientação, permanece no polímero. O formato da marca e do arranjo dos grupos funcionais são complementares à estrutura desejada. Este procedimento fornece polímeros porosos com uma estrutura de poros permanente, onde a vinculação preferencial para o estado de transição reduz a energia de ativação da reacção e, assim, consegue-se um efeito catalisador sobre a taxa de reacção. A ideia por trás dos catalisadores biomiméticos é clara e simples, mas o enorme número de variáveis na sua síntese e caracterização requer algumas estratégias de triagem racional. Acreditamos que essas estratégias poderiam evoluir do uso simultâneo e sinérgico de ferramentas de mecânica estatística com o trabalho experimental para a sua concepção racional. Aqui o nosso objectivo é capitalizar sobre uma metodologia desenvolvida recentemente [1], que apresenta um nível suficiente de realismo e detalhe, especificamente com base em campos de força exata, reflectindo alguns princípios básicos por trás da formação de materiais e a sua função. Nossa estratégia é imitar o processo real de formação do catalisador. Assim, a primeira tarefa do nosso modelo envolve a mistura e equilíbrio dos componentes necessários em proporções determinadas. Para esta contribuição, o objectivo é apresentar o estudo da mistura acetronitrilo + dimetilsulfóxido, amplamente utilizada como solvente na síntese de catalisadores para a hidrólise do p-nitrofenil acetato.

[1] Herdes C. and Sarkisov L. "Computer simulation of VOCs adsorption in atomistic models of molecularly imprinted polymers" **Langmuir** 25(9): 5352–5359.

Diffusion of Gases in Metal Containing Carbon Aerogels

LM Marques, FL Conceição, MML Ribeiro Carrott, PJM Carrott

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

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 fuel cells, supercapacitors, gas separation, hydrocarbon vapour recovery and carbon capture [1, 2]. Furthermore, the introduction of metals opens up the possibility of their use in various catalytic processes [3]. In addition to the mesoporosity, carbon aerogels also contain microporosity.

The carbon aerogels were obtained from 2,4-dihydroxybenzoic acid/formaldehyde polymer aerogels in the H form or containing metals, namely Fe, Ni and Cu, introduced by ion exchange before carbonisation of the polymer precursor. Adsorption of O₂, N₂, CO₂ and CH₄, was carried out at 298 K and diffusion coefficients estimated from the kinetic uptake curves. Some preliminary experiments on modifying the microporosity by chemical vapour deposition of benzene (CVD) were also carried out.

The results presented show that the diffusion of light gas molecules in carbon aerogels can not be interpreted solely on the basis of micropore diffusion, but that the very high mesopore volumes of the aerogel monoliths exert a strong influence on the kinetics of diffusion in these materials. The single gas uptakes and diffusion coefficients can be altered, on the one hand, by varying the % solids used during synthesis of the polymer precursor or by introducing different metals into the polymer hydrogel by ion exchange or, on the other hand, by CVD of benzene on the carbon aerogel.

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

[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] P.J.M. Carrott, L.M. Marques, M.M.L. Ribeiro Carrott, Microporous and Mesoporous Materials 131 (2010) 75-81

[3] C. Moreno-Castilla, F.J. Maldonado-Hódar, Carbon 43 (2005) 455-465

Desperdícios de Cortiça – Processos de Activação – Efeitos na Capacidade de Adsorção

PAM Mourão, PJM Carrott, MML Ribeiro Carrott

Centro de Química de Évora e Departamento de Química, Universidade de Évora

Rua Romão Ramalho nº59, 7000-671 Évora - Portugal

pamm@uevora.pt

O desenvolvimento da actividade industrial e das restantes actividades humanas surge frequentemente associado a um incremento da poluição tanto em meio aquoso (essencialmente em águas residuais, mas também potável) como atmosférica. Em consequência, o enfoque no desenvolvimento de produtos e processos que permitam a diminuição ou eliminação dos compostos químicos responsáveis por essa poluição, tem sido alvo de enorme interesse tanto pelo sector industrial como académico. Entre os vários processos, a adsorção continua a constituir um dos mais eficientes e entre os materiais adsorventes, os carvões activados são frequentemente os mais utilizados. Neste trabalho iremos apresentar e correlacionar os resultados mais significativos dos estudos relativos a um precursor lenho-celulósico especial no nosso país, a cortiça, discutindo os conhecimentos acumulados e linhas actuais de investigação.

Com os resultados alcançados por um conjunto representativo dessas amostras, demonstra-se a potencialidade de utilização de alguns desses novos materiais no domínio das aplicações em adsorção, tanto em fase gasosa como em fase líquida. Esta contribuição soma-se a muitas outras, que incidem sobre a sua utilização em aglomerados, revestimentos e isolamentos, na tentativa de valorizar a exploração de uma árvore fundamental na agricultura portuguesa, o sobreiro. Os desperdícios envolvidos podem resultar tanto de actividades a montante como a jusante, envolvendo não só a produção florestal, mas também o tratamento e transformação industrial, bem como produtos derivados da cortiça, entre outras.

Agradecimentos

Este trabalho foi suportado pela *Fundação para a Ciência e a Tecnologia*, através do projecto: Plurianual Finance Project Centro de Química de Évora (619).

Despoluição de águas por remoção de mercúrio através de carvões activados

JV Nabais, C Laginhas, P Carrott, M Ribeiro Carrott, A Ramires
Escola Ciências e Tecnologia, Dep Química, Centro de Química de Évora,
jvn@uevora.pt

Os metais pesados são extremamente tóxicos para os organismos vivos, mesmo quando presentes em baixa concentração. Esta toxicidade tem origem na sua capacidade para se acumularem e persistirem no meio ambiente e cadeia alimentar. Dentro dos metais pesados, o mercúrio merece especial atenção pois os seus compostos solúveis em água apresentam elevada velocidade de adsorção pela pele, pulmões e tracto gastrointestinal. Por este motivo, o mercúrio está incluído na lista dos poluentes prioritários pelas agências ambientais de todo o mundo, tanto mais que ainda é hoje em dia utilizado num conjunto variado de aplicações artesanais e industriais. Torna-se necessário, portanto, desenvolver metodologias onde a sua utilização seja substituída por métodos mais amigos do ambiente e também desenvolver materiais e métodos que permitam uma mais eficaz remoção de mercúrio de soluções aquosas, com especial impacto na despoluição de águas.

Foram desenvolvidos carvões activados a partir de precursores lignocelulósicos, designadamente videira, endocarpo de café e casca de amêndoa por activação com dióxido de carbono. Foi estudada a adsorção de 3 espécies diferentes de mercúrio: Hg^{2+} , HgCl_2 e $[\text{Hg}(\text{Cl})_4]^{2-}$.

Podemos constatar que a espécie Hg^{2+} apresenta uma adsorção preferencial quando comparada com a adsorção das restantes espécies. As capacidades máximas de remoção de mercúrio em soluções aquosas foram de 2.7, 2.5 e 0.8mmol/L respectivamente para as espécies Hg^{2+} , HgCl_2 e $[\text{Hg}(\text{Cl})_4]^{2-}$. Os melhores resultados foram obtidos com as amostras produzidas a partir da videira.

Como principal conclusão podemos apontar a considerável capacidade para a remoção de mercúrio por parte dos carvões activados testados.

Agradecimentos – Os autores agradecem à Fundação para a Ciência e Tecnologia e ao European Regional Development Fund (FEDER) pelo apoio financeiro para a realização deste trabalho (Projecto PTDC/CTM/66552/2006).

Valorização de matéria-prima renovável com catalisadores heterogéneos

DS Pito¹, PA Ferreira¹, CS Caetano¹, JE Castanheiro^{1,2}

¹*Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora*

²*Centro de Química de Évora, Universidade de Évora, jefc@uevora.pt*

A diminuição das reservas de petróleo e o aumento da emissão de CO₂ são os principais factores que têm levado à substituição das actuais matérias-primas fósseis por fontes renovável. Novos processos químicos e novos catalisadores poderão contribuir para um desenvolvimento sustentável. Actualmente, a maioria dos processos químicos são realizados na presença de catalisadores homogéneos, os quais colocam sérios problemas ambientais, obrigando à sua separação dos produtos da reacção e ao tratamento subsequente do efluente do processo. Os catalisadores heterogéneos permitem uma fácil separação da mistura reaccional, são regeneráveis/reutilizáveis e são benignos para o meio ambiente. É neste contexto que surge esta comunicação: mostrar alguns trabalhos que têm vindo a ser desenvolvidos no CQE, nos últimos anos e em colaboração com outras Instituições, com o objectivo de valorizar matéria-prima renovável a produtos com valor acrescentado, na presença de catalisadores heterogéneos. Os recursos renováveis que têm vindo a ser utilizados como matéria-prima são:

-Terpenos (α -pineno, canfeno, limoneno), que por acetoxilação e metoxilação com catalisadores sólidos (p.e. zeólito beta, heteropoliácidos suportados em sílica¹) conduzem à formação de produtos de Química Fina (fragrâncias e perfumes);

-Ácidos gordos (palmítico, oleico e esteárico) e óleo de soja, que por esterificação e transesterificação, respectivamente, com metanol e etanol na presença de catalisadores sólidos (p.e. polímeros com grupos ácido sulfónico²) conduzem à formação de biodiesel;

-Glicerol (resíduo da produção de biodiesel) que por esterificação com ácido acético na presença de catalisadores sólidos (heteropoliácidos encapsulados no zeólito Y³) produz bio-aditivos para combustíveis.

Agradecimentos: Os autores gostariam de agradecer aos Professores A. Ramos, I. Fonseca e J. Vital do REQUIMTE-UNL.

¹D.S. Pito et al., Appl. Catal. A:Gen. 373 (2010) 140. ²C.S. Caetano et al., Appl. Catal. A:Gen. 359 (2009) 41. ³P. Ferreira et al., Catal. Commun. 10 (2009) 481.

Síntese de complexos de Ru(II) e Fe(II) contendo benzo[c]tiofeno com aplicações em óptica não linear

TJL Silva; PJ Mendes

Centro de Química de Évora, Rua Romão Ramalho 59, 7000-671 Évora

tjsilva@fc.ul.pt; pjgm@uevora.pt

O desenvolvimento da nanotecnologia trouxe à comunidade científica um novo paradigma: como incorporar nesses dispositivos componentes de dimensão molecular capazes de conduzir, processar e armazenar informação, tendo ainda em conta que todos eles envolvem a integração de funções complexas, como por exemplo a função “interruptor” (do inglês *switch*), que envolverão alterações estruturais e electrónicas nessas moléculas? ^[1]

A comutação molecular (*molecular switching*) está relacionada com o processo pelo qual existe alteração entre duas formas de uma molécula, genericamente designadas de forma *on* e *off*. Recentemente surgiu um novo conceito de comutação molecular, que tem por base a óptica não linear, e que envolve a alteração por meios químicos ou físicos de um composto entre uma forma *on* (correspondente a elevados valores de hiperpolarizabilidade) e *off* (correspondente a baixos valores de hiperpolarizabilidade).^[2]

Prosseguindo os estudos na séries de derivados acetilénicos de tiofenos como possíveis comutadores moleculares, são apresentadas a síntese e caracterização espectroscópica de novos complexos metálicos de derivados de benzo[c]tiofenos.^[3] Os compostos sintetizados foram também alvo de estudos de DFT (*Density Functional Theory*) com o intuito de, não só compreender as características electrónicas que regem o fenómeno de óptica não linear mas também prever o comportamento das espécies quando submetidas a uma oxidação. Além de discutidas algumas vias de síntese para os derivados de benzo[c]tiofenos serão também apresentados detalhes estruturais dos compostos obtidos teoricamente. A caracterização espectroscópica dos compostos mostram a existência de bandas de transferência de carga muito intensas que são associadas a elevados valores de β na forma “on” (não oxidada), enquanto as simulações comprovaram que deverão ser obtidos baixos valores de hiperpolarizabilidade para a forma “off” (oxidada).

[1] – Mançois, F.; Rodriguez, V.; Pozzo, J-L.; Champagne, B.; Castet, F.; *Chem. Phys. Lett.*, 427, 153-158, 2006

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

[3] – Mohanakrishnan, A.; Lakshmikantham, M.; McDougal, C.; Cava, M.; *J. Org. Chem.* 63, 3105-3112, 1998; Kiebooms, R.; Adriaensens, P.; Vanderzande, D.; Gelan, J.; *J. Org. Chem.*, 62, 1473-1480, 1997.

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

SM Martins, AM Pereira

Centro de Química, Universidade de Évora.

amp@uevora.pt

As coumarinas constituem uma família vasta de compostos abundantes em plantas, que apresentam uma grande variedade de actividades biológicas e aplicações terapêuticas tais como: actividades anticoagulante, vasodilatadora, estrogénica, foto-sensibilizadora dérmica, antimicrobiana, anti-helmíntica, moluscicida, sedativa e hipnótica, analgésica e antipirética, as quais dependem do seu padrão de substituição.

As coumarinas constituem igualmente 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. 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.

De acordo com estes pressupostos desenvolveu-se uma nova metodologia para a síntese de coumarinas substituídas por grupos arilo na posição 3, através da optimização das condições experimentais da reacção de Heck (halogenetos, catalisador, temperatura, solvente, ligandos, base, ...). Foram isolados e caracterizados diversos derivados, nomeadamente a 3-fenilcoumarina, a 3-(4-bromofenil)coumarina, a 3-(4-iodofenil)coumarina, a 3-(4-etilfenil)coumarina, a 3-(4-formilfenil)coumarina, a 3-(4-nitrofenil)coumarina e a 3-(4-metilacrilato-fenil)coumarina).

A formação exclusiva de derivados 3-substituídos foi igualmente avaliada através de reacções de Heck em derivados do ácido cinâmico, já que a regioquímica deste tipo de reacção é normalmente determinada pela estereoquímica e natureza do grupo substituinte do alceno.

Síntese de Coumarinas com Potencial Actividade Antioxidante

SM Martins, GS Palmeiro, AM Pereira

Centro de Química, Universidade de Évora.

amp@uevora.pt

Os radicais livres são espécies com um ou mais electrões desemparelhados que são produzidos no metabolismo de células, saudáveis ou com patologias, devido a substâncias xenobióticas ou a radiação ionizante. As espécies aceitadoras de electrões, assim como o oxigénio molecular reagem facilmente com os radicais livres, tornando-se elas próprias espécies radicalares (espécies reactivas de oxigénio [ROS]).

Espécies reactivas com tempos de semi-vida reduzidos geradas *in situ* podem reagir com espécies não radicalares e produzir reacções em cadeia. Deste modo, a peroxidação das membranas lipídicas produz espécies radicalares orgânicas que iniciam as reacções em cadeia, o que permite compreender muitos dos efeitos das espécies reactivas de oxigénio (ROS) sobre as membranas.

Os compostos antioxidantes são hoje amplamente usados como aditivos alimentares para prevenir a degradação oxidativa dos alimentos. Revelam igualmente um papel deveras importante no tratamento de muitas doenças degenerativas ou crónicas, como a arteriosclerose, a artrite, doenças neuro-degenerativas, declínio do sistema imunitário, cancro, desde que um elevado número de evidências experimentais revelaram a relação directa entre a produção de espécies reactivas de oxigénio (ROS) e o início e/ou progressão dessas patologias.

O elevado potencial antioxidante da esculetina (6,7-di-hidroxicoumarina), um composto natural, permite antever que a síntese de derivados substituídos na posição 3 deverá originar compostos com potencial antioxidante superior, devido a uma maior deslocalização do sistema de electrões π .

De acordo com o exposto foram sintetizados novos derivados da 6,7-di-hidroxi-coumarina, nomeadamente a 3-bromo-6,7-di-hidroxicoumarina e a 3-[(E)-2-fenil-eténil]-6,7-di-hidroxicoumarina, com o intuito de aumentar o potencial antioxidante.

A actividade antioxidante dos compostos sintetizados foi avaliada através do teste do radical livre 1,1-difenil-2-picril-hidrazil (DPPH).

Avaliação de Coumarinas como Potenciais Sondas Químicas para Detecção de Iões Metálicos

GS Palmeiro, AM Pereira

Centro de Química, Universidade de Évora.

amp@uevora.pt

Os iões metálicos desempenham um papel relevante nos sistemas biológicos, e a sua detecção assume significativo relevo em questões ambientais, em medicina e na biologia. Por um lado, os iões metálicos, como por exemplo os iões de Cu^{2+} , são essenciais ao corpo humano, pois participam na catálise enzimática e na expressão genética. Por outro, um elevado nível de iões metálicos nesses mesmos sistemas biológicos, pode ser tóxico como é o caso do Ni^{2+} , que em concentrações elevadas causa a diminuição do crescimento das plantas por redução das respectivas concentrações de clorofila *a* e *b*, do citocromo *b₆* e *b₅₅₉* e da ferredoxina. Outro exemplo da influência dos iões metálicos na actividade biológica, é o do efeito da exposição prolongada a Cd^{2+} que causa disfunções renais, diminuição da capacidade pulmonar e enfisemas.

O desenvolvimento de sondas químicas, estruturalmente simples e que facilmente assinalem a sua complexação, providenciando um método sensível e selectivo capaz de reconhecer e avaliar a concentração de diferentes substratos, tem vindo a ter cada vez mais interesse. O desenho de cada sonda química apresenta o problema da sua implementação para um eficiente mecanismo de tradução, pois a sua ligação a um substrato deverá provocar uma modificação da emissão da sonda.

Alguns derivados de coumarinas são frequentemente encontrados como unidades geradoras de sinal em sondas e em sofisticados sistemas fotofísicos.

Neste contexto, foram avaliadas como potenciais sondas químicas para a detecção de iões metálicos (Li^+ , Na^+ , K^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+} , Mn^{2+} , Fe^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Ag^+ , Cd^{2+} , Hg^{2+} e UO_2^{2+}) o 1,2-di-hidroxibenzeno, a 6,7-di-hidroxicoumarina e a 3-[(*E*)-2-fenileténil]-6,7-di-hidroxicoumarina.

Estudos de biodeterioração e análise cromática dos frescos renascentistas da Ermida de Santo Aleixo (Montemor-o-Novo)

C Ramos¹, V Paixão¹, AT Caldeira^{1,2}, MR Martins^{1,3}, S Valadas^{1,4},

J Mirão^{4,5}, M Gil^{2,4}, A Candeias^{1,2,4,6}

¹*Departamento de Química, Universidade de Évora*

²*Centro de Química de Évora, Universidade de Évora*

³*Instituto de Ciências Agrárias e Mediterrânicas, Universidade de Évora*

⁴*Laboratório HERCULES – Herança Cultural Estudos e Salvaguarda, 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*

candeias@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. Trata-se de um templo constituído por uma capela-mor quadrangular, coberta por uma abóbada artesonada, uma nave única de módulo rectangular. O que resta deste 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 objectivos proceder à caracterização das pinturas murais, em particular no que respeita aos pigmentos, e efectuar um estudo microbiológico dos locais que apresentavam deterioração com vista a isolar e identificar as diferentes populações de microrganismos e avaliar o seu papel na deterioração destas pinturas.

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. A morfologia das colónias foi avaliada em preparações microscópicas. A coloração de Gram e alguns testes clássicos, como o teste da catalase, oxidase e de esporulação foram utilizados para identificação 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).

O estudo microbiológico permitiu isolar 34 estirpes bacterianas (eg. cocos Gram +, bacilos Gram +, Actinomycetes sp.), 7 estirpes de leveduras e 53 estirpes de fungos filamentosos nos sete locais de amostragem. No que respeita às populações fúngicas os géneros dominantes foram *Cladosporium* e *Penicillium*, embora também tenham sido isoladas estirpes de outros géneros, nomeadamente, *Aspergillus* sp. e *Trichoderma* sp.. Os estudos prosseguem no sentido de proceder a uma melhor caracterização da população colonizadora e de correlacionar a contaminação fúngica com o estado de deterioração das pinturas.

Estudo comparativo de vidros arqueológicos romanos por Sync- μ -XRF confocal, PIXE/PIGE externo e VP-MEV-EDS

J Mirao^{a,b}, N Schiavon^{a,b}, T Ferreira^{a,c}, C Dias^{a,c}, D Teixeira^{a,d}, A Carneiro^e,
MC Lopes^f, T Calligaro^e, R Simon^g, A Candeias^{a,c,h}

^a Laboratório HERCULES, Universidade de Évora, Largo Marquês de Marialva 8, Évora

^b Centro de Geofísica de Évora, Universidade de Évora, Évora

^c Centro de Química de Évora e Departamento de Química, Universidade de Évora, Évora

^d ICAM e Departamento de Química, Universidade de Évora, Évora

^e Centro Interdisciplinar de História, Culturas e Sociedades da Universidade de Évora, Évora

^f Centro de Estudos Arqueológicos das Universidades de Coimbra e Porto, Coimbra

^f C2RMF, AGLAE accelerator, Palais du Louvre, Paris, França

^g ANKA synchrotron, Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe, Alemanha

^h Laboratório José de Figueiredo, Instituto dos Museus e da Conservação, Lisboa

A Península Ibérica foi, durante o Império Romano, uma região de abundantes recursos naturais. A importância civilizacional da região sudoeste da Hispânia é hoje visível nos achados arqueológicos tanto de grandes urbes como *Emerita Augusta* (Mérida) ou *Pax Júlia* (Beja), mas também de outros aglomerados populacionais de dimensões mais reduzidas como a cidade de Ammaia (Marvão).

O estudo material de achados arqueológicos permite, através da diferenciação entre os materiais importados e aqueles locais, adquirir um conhecimento mais profundo das trocas comerciais e das redes de comércio existentes nesta região durante o tempo da ocupação Romana.

Neste trabalho são apresentados os resultados obtidos com recurso a técnicas micro-analíticas não destrutivas de vidros romanos datados dos séculos I a V e recolhidos em diferentes estações arqueológicas do Alentejo designadamente São Pedro (Fronteira), Beja e Ammaia. Foram utilizadas as técnicas de micro-espectrometria de fluorescência de raios X confocal de sincrotrão (Sync- μ -XRF confocal), espectrometria de raios X e raios γ induzida por prótons (PIXE/PIGE) externo e microscopia electrónica de varrimento de pressão variável acoplada a espectrometria de raios X por dispersão de energias (VP-MEV-EDS).

A caracterização material dos vidros estudados permitiu identificar a sua composição elementar em termos de elementos maioritários e minoritários, fluxos, inclusões e cromóforos. Foi efectuada uma avaliação das patologias dos vidros tendo sido identificados processos de degradação envolvendo padrões de lixiviação. A análise estatística dos resultados permitiu identificar *clusters* de acordo com a origem cor e idade dos vidros.

Este estudo evidenciou que o uso de diferentes técnicas analíticas é essencial para a caracterização material de vidros. Através da combinação da alta sensibilidade de Sync- μ -XRF confocal, a resolução espacial microscópica de VP-MEV-EDS e a capacidade de detecção de elementos leves das microsondas protónicas (PIXE/PIGE) com fluxo de hélio, em conjunto com a informação sobre os elementos minoritários e traço é possível obter o *fingerprinting* de cada amostra e estabelecer padrões de composição para conjuntos.

Argamassas antigas:

conservação, restauro, história e tecnologia

A Candeias^{1,2,3}, S Valadas^{1,3}, P Adriano⁴, A Santos Silva⁴, R Veiga⁵, J Mirão^{1,6}

¹Laboratório HERCULES – Herança Cultural Estudos e Salvaguarda, Universidade de Évora

²Laboratório José de Figueiredo, Instituto dos Museus e Conservação

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

⁴Laboratório Nacional de Engenharia Civil, Departamento de Materiais

⁵Laboratório Nacional de Engenharia Civil, Departamento de Edifícios

⁶Centro de Geofísica de Évora e Departamento de Geociências da Universidade de Évora

As argamassas tradicionais são materiais compósitos constituídos por um ligante (usualmente, cal aérea ou cal hidráulica), agregados (areia siliciosa, calcítica ou dolomítica) e alguns aditivos (pó de tijolo, cinzas vulcânicas, entre outros) de forma a aumentar a adesão, a trabalhabilidade, a resistência e a durabilidade.

A caracterização de argamassas permite determinar as suas composições simplificadas e os traços característicos e relacioná-las com as propriedades físicas, identificar os produtos de alteração e em certos casos, determinar a proveniência dos materiais utilizados na formulação das argamassas.

Assim, o estudo da composição de argamassas antigas, com recurso a técnicas de caracterização química, mineralógica e microestrutural, desempenha um papel fundamental para a preservação do património cultural, guiando todas as acções de conservação e restauro. Por outro lado, permite obter um conhecimento bastante profundo sobre as técnicas de construção, eventuais reparações e desempenho das mesmas. Este tipo de informação é passível de ser integrado historicamente, contribuindo para o conhecimento das sociedades que ergueram os edifícios.

As metodologias de caracterização físico-química recorrem frequentemente a técnicas de caracterização físico-química, nomeadamente difracção de raios X (DRX), análise termogravimétrica (ATG), microscopia óptica (MO), microscopia electrónica de varrimento acoplada a espectroscopia de raios X por dispersão de energias (MEV-EDS), espectrofotometria de absorção atómica (EAA), potenciometria, sorção de água por capilaridade, resistência mecânica e porosimetria de mercúrio. No decorrer dos últimos anos, foram aplicadas a argamassas neolíticas, romanas (e.g. Mértola, Tróia), medievais (e.g. Sé de Évora e Elvas) e posteriores ao Renascimento (e.g. fortes da barra do Tejo).

Estudos de envelhecimento artificial de lã tingida com garança, um corante natural vermelho

A Manhita^{1,2}, V Santos¹, H Vargas³, I Ribeiro³, A Candeias¹⁻³,
D Teixeira^{2,4}, T Ferreira^{1,2}, CB Dias^{1,2}

¹*Centro de Química de Évora, Departamento de Química da Universidade de Évora*

²*Laboratório HERCULES – Herança Cultural Estudos e Salvaguarda, Universidade de Évora*

³*Instituto dos Museus e Conservação, Departamento de Estudos Materiais, Lisboa*

⁴*Instituto de Ciências Agrárias Ambientais e Mediterrânicas, Évora*

anamanhita@yahoo.com.br

Muitos dos corantes naturais ainda hoje utilizados remontam a tempos pré-históricos. Actualmente ainda é comum a utilização em tinturaria artesanal das raízes da garança (*Rubia tinctoria* L.). para tingir fibras em tons de vermelho. A alizarina e a purpurina são os principais cromóforos deste corante e ambos possuem uma estrutura do tipo antraquinona. Diferentes combinações de utilização de corante e mordente produzem uma variedade considerável de cores e tons na peça tingida. Contudo, quando expostas à luz, as cores tendem a desvanecer. Apesar das consequências destes processos de fotodegradação na conservação de têxteis históricos, os mecanismos pelos quais eles ocorrem são ainda desconhecidos.

A garança foi utilizada neste trabalho para tingir lã mordida com diferentes quantidades de sais de alumínio, ferro e cobre (mordentes) e o procedimento seguido baseou-se em dois métodos distintos de tingimento. O catião do mordente presente nas amostras de lã foi quantificado por ICP-AES e AAS. As fibras foram sujeitas a envelhecimento artificial controlado e os parâmetros de cor foram medidos por colorimetria. Após extracção do corante das amostras de lã, a variação relativa dos cromóforos durante o processo de envelhecimento foi avaliada por LC-ESI-MS.

Concluiu-se que a natureza do ião mordente, a sua concentração e processo de tingimento têm grande impacto na tonalidade final da lã. A quantidade de iões metálicos nas amostras de lã é muito pequena quando comparada com a disponível no banho corante. A degradação dos cromóforos é mais rápida no início da exposição à luz e a alizarina degrada mais rapidamente que a purpurina. A natureza química do mordente também influencia a foto-degradação dos cromóforos. O alumínio parece promover a fotodegradação dos cromóforos, facto de extrema importância devido à ampla utilização deste mordente em amostras históricas.

Actividade antimicrobiana e antioxidante do óleo essencial de *Lavandula luisieri* (Rozeira) Rivas Martínez

S Arantes¹, MR Martins^{1,2}, M Pereira^{3,2}, J Cruz Morais^{1,2}

¹Departamento de Química, Universidade de Évora

²ICAAM, Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas

³Departamento de Planeamento, Ambiente e Ordenamento, Universidade de Évora

mrm@uevora.pt

A *Lavandula luisieri* (Rozeira) Rivas Martínez pertence à família *Labiatae*, vulgarmente conhecida por rosmaninho, com utilização em fitoterapia e aromaterapia. Morfologicamente, é um caméfito lenhoso e tomentoso, com folhas oblongas a lanceoladas acinzentado-tomentosas. As inflorescências são espigas cilíndricas pálido-purpúreas ou púrpura-anegradas, curtamente pedunculadas ou sésseis. É endémica da Península Ibérica, muito comum no Sudoeste de Espanha e no Centro e Sul de Portugal, em particular no Alentejo. É uma planta termófila, típica dos sargaçais de solos xistosos ou calcários, bastante secos.

Neste trabalho pretendeu-se caracterizar o óleo essencial de *L. luisieri* no que concerne à sua composição química e à sua actividade biológica, designadamente à actividade antimicrobiana e antioxidante. O material vegetal foi colhido de uma mancha de *L. luisieri* na Herdade da Mitra (Évora), em Outubro de 2009 e o óleo essencial foi extraído, das folhas desta planta, por hidrodestilação, num aparelho tipo Clevenger. O rendimento de extracção foi de $0,43 \pm 0,07$ % e a densidade do óleo obtido foi de 0,936.

A composição química do óleo essencial foi caracterizada por GC/FID, apresentando como componentes maioritários 1,8-cineol (42%), acetato de bornilo (9%) e canfeno (5%).

A actividade antimicrobiana foi estudada, pelo método de difusão em meio sólido, com determinação do halo de inibição, face a oito estirpes de bactérias patogénicas e seis estirpes de fungos filamentosos, utilizando antibióticos comerciais e nistatina como controlo. O óleo essencial de apresentou actividade antibacteriana face às estirpes de *Escherichia coli*, *Proteus mirabilis*, *Morganella morganii*, *Klebsiella pneumoniae*, *Salmonella enteritidis*, *Staphylococcus aureus* e *Enterococcus faecalis*, e actividade antifúngica face às estirpes de *Aspergillus niger*, *Aspergillus japonicus*, *Fusarium oxysporum* e a 2 estirpes de *Penicillium* spp.

A actividade antioxidante foi avaliada por dois métodos complementares, radical livre DPPH (2,2-diphenyl-1-picrylhydrazyl) e sistema β -caroteno/ácido linoleico. O óleo essencial apresentou actividade antioxidante pelos dois métodos estudados, no entanto apresentou maior actividade face ao método do β -caroteno/ácido linoleico

Face aos resultados obtidos, os estudos prosseguem no sentido completar a caracterização química do óleo essencial das folhas de *L. luisieri*, colhidas em diferentes épocas do ano, no mesmo local, e as respectivas actividades antimicrobiana e antioxidante, tendo em vista avaliar a sua evolução metabólica ao longo do ano.

Agradecimentos: Ao Laboratório Flaviano Gusmão, Lda. (Évora), pela cedência das estirpes bacterianas.

Estudo para o desenvolvimento de métodos para quantificação de *Phl p5* em amostras de ar exterior colhidas na cidade de Évora

R Ribeiro¹, CM Antunes^{1,4}, R Brandão^{2,3}

¹Departamento de Química, ²Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas (ICAAM); ³Departamento Biologia, Universidade de Évora, Largo dos Colegiais 2, 7000 Évora UE; ⁴Centro de Neurociências e Biologia Celular (CNC), Universidade de Coimbra, 3004-517 Coimbra, mma@uevora.pt

As doenças alérgico-respiratórias decorrentes da exposição a pólenes na atmosfera constituem na actualidade um problema de saúde pública, afectando cerca de 40% da população europeia. Em Portugal, os pólenes das gramíneas são uma das principais fontes de aeroalergénios atmosféricos, sendo o *Phl p5* o principal alergénio da família *Phleum pratense*. e responsável por 80 a 90% das rinites e asma brônquica que atingem das crianças e adolescentes e 40 a 50% dos adultos já asmáticos.

Assim, a realização de estudos para o desenvolvimento de metodologias que permitam prever o potencial alergénico da atmosfera e assim contribuir para desenvolver estratégias de prevenção da patologia alérgica são muito relevantes. Neste trabalho pretende-se desenvolver um testes imunológico para detecção e quantificação do alergénio *Phl p5*.

Numa plataforma meteorológica situada no centro da cidade de Évora (Colégio Luís António Verney, Fase III), foram monitorizados em simultâneo e diariamente o conteúdo polínico atmosférico de *Poaceae* e o aeroalergénio *Phl p5*. Para a contagem dos primeiros, utilizou-se um colector volumétrico do tipo “Hirst” (Burkard Seven Day Recording Volumetric Spore Trap[®]) e os segundos foram monitorizados mediante a utilização de um colector de impacto de grande volume (CHEMVOL) com filtros de poli-uretano, entre os dias 30 de Abril e 8 de Julho de 2009. Após extracção, a quantificação dos aeroalergénios efectuou-se mediante uma técnica de ELISA tipo “sandwich”, utilizando anticorpos específicos.

Durante a época polínica de 2009 observaram-se níveis elevados de pólenes de gramíneas (entre 2 de Maio e 1 de Junho de 2009). Observou-se ainda que o conteúdo de alergénio *Phl p5* estava directamente correlacionado com as contagens polínicas de pólenes de *Poaceae*.

Estes resultados sugerem que a quantificação directa dos aeroalergénios pode contribuir, em conjunto com as contagens polínicas, para definir com melhor precisão do risco alérgico. Este estudo prosseguirá na época polínica de 2010 com vista à certificação do método.

Agradecimentos: Este trabalho realiza-se no âmbito do projecto europeu HIALINE (“grant agreement” 20081107 II.5.1).

Estudo para o desenvolvimento de métodos para quantificação de Ole e1 em amostras de ar exterior colhidas na cidade de Évora.

R Ferro¹, CM Antunes^{1,4}, R Brandão^{2,3}

¹Departamento de Química, ²Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas (ICAAM); ³Departamento Biologia, Universidade de Évora, Largo dos Colegiais 2, 7000 Évora UE; ⁴Centro de Neurociências e Biologia Celular (CNC), Universidade de Coimbra, 3004-517 Coimbra, cmma@uevora.pt

As doenças alérgico-respiratórias decorrentes da exposição a pólenes na atmosfera representam um dos principais problemas clínicos da actualidade, afectando cerca de 40% da população europeia. Em Portugal, a polinização da oliveira é seguramente uma das principais fontes de aeroalergénios atmosféricos e conseqüentemente uma das maiores causas de alergia respiratória, sendo a Ole e1 a glicoproteína mais abundante do grão de pólen e o alergénio que mais significativamente contribui para o grau de alergenicidade deste pólen.

Assim, o desenvolvimento de metodologias que permitam prever o potencial alergénico da atmosfera são da maior relevância já que poderão contribuir para desenvolver estratégias de prevenção da patologia alérgica. Neste trabalho pretende-se desenvolver e otimizar testes imunológicos para detecção e quantificação de Ole e1.

Numa plataforma meteorológica situada no centro da cidade de Évora (Colégio Luís António Verney - Fase III), foram monitorizados em simultâneo e diariamente o conteúdo polínico atmosférico da *Olea europaea* e do aeroalergeno Ole e1. Para a contagem do primeiro, utilizou-se um colector volumétrico do tipo "Hirst" (Burkard Seven Day Recording Volumetric Spore Trap[®]) e o segundo foi monitorizado mediante a utilização de um colector de impacto de médio volume (CHEMVOL) com filtros de poli-uretano, entre os dias 30 de Abril e 8 de Julho de 2009. Após extracção, a quantificação do aeroalergénio efectuou-se mediante uma técnica de ELISA tipo "sandwich", utilizando um anticorpo específico.

Durante a época polínica de 2009, observaram-se níveis elevados de pólen de oliveira entre 2 de Maio e 30 de Maio. Observou-se ainda que o conteúdo do alergénio Ole e1 estava directamente correlacionado com as contagens polínicas de *Oleaceae*.

Estes resultados sugerem que a quantificação directa dos aeroalergénios pode contribuir, em conjunto com as contagens polínicas, para definir com melhor precisão o risco alérgico.

Este estudo continuará na época polínica de 2010 com vista à certificação do método.

Agradecimentos: Este trabalho realiza-se no âmbito do projecto europeu HIALINE ("grant agreement" 20081107 II.5.1).

Efeito Hipoglicemiante de um Extracto Aquoso de *Cytisus multiflorus*

IP Vieira¹, AC Costa^{1,2}, DM Teixeira^{1,2,3}, CM Antunes^{1,4}, J Cruz Morais^{1,2}

¹Departamento de Química; ²Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas (ICAAM), ³Laboratório Hércules, Universidade de Évora, Largo dos Colegiais 2, 7000 Évora;

⁴Centro de Neurociências e Biologia Celular (CNC), Universidade de Coimbra, 3004-517 Coimbra; mma@uevora.pt

Actualmente o interesse pelas plantas medicinais tem vindo a aumentar pois estas apresentam diversas actividades farmacológicas, entre as quais se inclui o efeito anti-diabético. A flora nativa portuguesa inclui várias plantas às quais se atribuem propriedades hipoglicemiantes, sem que estas tenham, no entanto, sido ainda cientificamente demonstradas.

O objectivo deste trabalho foi estudar a possível acção hipoglicemiante de *Cytisus multiflorus*, uma planta da flora portuguesa tradicionalmente usada como agente etnofarmacológico no tratamento da diabetes.

O efeito do extracto aquoso de *C. multiflorus* foi avaliado em roedores que apresentaram anomalias das curvas de tolerância à glicose oral, seleccionados numa colónia de ratos Wistar. Com este ensaio, determinaram-se as insulinemias pós-prandiais e foram avaliados alguns indicadores serológicos e histológicos de toxicidade [1]. Em resposta a este tratamento com o extracto de *C. multiflorus*, observou-se uma diminuição significativa das glicemias pós-prandiais dependente da dose. Observou-se também, um aumento dependente da dose das insulinemias pós-prandiais. Deste modo, o extracto aquoso teve um efeito hipoglicemiante, provavelmente devido à estimulação da secreção de insulina, comprovando-se a sua validade como agente etnofarmacológico para o controlo da diabetes tipo 2 [1].

Perante estas evidências, procedeu-se ao fraccionamento do extracto de *C. multiflorus*, de forma a caracterizá-lo e a identificar as principais famílias de compostos nele presentes. Além disso, pretende-se também avaliar *in vitro* a potencial acção das fracções, identificando assim a(s) fracção(ões) activa(s) no controlo da diabetes tipo 2.

Futuramente, estas fracções irão ser testadas em linhas celulares secretoras de insulina (BRIN-BD11) e/ou estudos *in vivo*, para avaliar o possível efeito insulínico bem como os mecanismos de acção do extracto. Uma vez identificadas as fracções activas, proceder-se-á à identificação dos principais princípios activos que possam ser responsáveis pela actividade hipoglicemiante e/ou insulínica, utilizando técnicas analíticas como Cromatografia Líquida de Elevada Eficiência (HPLC) com detecção de *Diode Array* (HPLC-DAD) e de Espectrometria de Massa (LC-MS).

[1] C.M. Antunes, L.R. Areias, I.P. Vieira, A.C. Costa, M.T. Tinoco, & J. Cruz-Morais (2009). Rev. Fitoterapia 9 (Supl.1): 91 (Abstract).

Aproximações experimentais ao stresse e regulação metabólica

I Alves-Pereira, A Pereira, C Antunes, E Vieira, J Capela-Pires, M Pinheiro, A Conim,
C Rosado, M Candeias, P Ruivo, S Gonçalves, R Ferreira

*Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora,
Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas (CTA-ICAAM), UÉvora*

raf@uevora.pt

Os sistemas vivos distinguem-se dos inanimados pela forma como contrariam a segunda lei da termodinâmica que não prevê a existência de processos cíclicos na natureza e preconiza uma tendência contínua e unidirecional da ordem para a desordem. O aparecimento repetitivo de uma unidade individual pode acontecer devido a substituição fortuita, quando a mesma configuração reaparece com elevada frequência, ou devido a replicação, quando providencia uma cópia de si própria, conservando a sua organização complexa, mesmo que a entidade original seja posteriormente destruída, como acontece na reprodução dos organismos vivos. A caracterização dos seres vivos enquanto sistemas individualizados engloba o crescimento, a especialização celular e os sistemas de sinalização inter e intracelular. Estudos com *S. cerevisiae* e outras leveduras realizados desde meados do século XX têm conduzido a aplicações valiosas na indústria e na medicina com elevados benefícios para a vida humana. Desde então ficou bem estabelecido que as leveduras são sistemas ideais para investigar e ilustrar com êxito mecanismos celulares fundamentais relacionados com energética bioquímica, capacidade antioxidante, biotransformação e morte celular de eucariotas, uma vez que sendo unicelulares, podem ser cultivadas em meios definidos dando ao investigador o controlo completo de parâmetros ambientais. Por outro lado, as informações resultantes da sequenciação do genoma das leveduras tornaram-se referências úteis na caracterização de sequências génicas relacionadas com patologias humanas, animais ou vegetais, ou ainda na comparação entre organismos unicelulares. Neste contexto e no âmbito da linha de investigação em que estamos envolvidos, *stress and metabolic regulation*, desenvolveram-se diversos trabalhos com leveduras vnicas nativas de mostos alentejanos que tem permitido esclarecer mecanismos de resposta a poluentes metálicos como óxidos de vanádio e nanopartículas de titânio, fitofármacos, como fenilureias, em termos de resposta antioxidante e apoptose, metabolismo glucídico, lipídico e de biotransformação de leveduras envolvendo a caracterização metabólica de compartimentos celulares como o citoplasma, o mitocondrio, o peroxissoma e o retículo endoplasmático, que serão apresentados e discutidos na apresentação deste trabalho. Considerando que a diferenciação celular leva à formação de linhagens celulares com organização molecular e propriedades metabólicas distintas, fortemente reguladas, que permitem a construção de sistemas multicelulares a partir de um único zigoto, condicionados pelo património genético e pelo ambiente, evoluimos recentemente e em colaboração com colegas do Departamento de Biologia e do Centro de Tecnologia Animal do Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas (CTA-ICAAM) para aplicação dos conhecimentos adquiridos com as leveduras a modelos animais e vegetais, tendo em vista a sua caracterização fenotípica.

Actividade biológica de complexos proteína-polissacárido produzidos em culturas de *Pleurotus ostreatus* utilizando resíduos de girassol

A Terrasso^a, MR Martins^{a,c}, C Salvador^a, J Sampaio^a,
MF Candeias^{a,c}, JS Arteiro^{a,b}, AT Caldeira^{a,b}

^aDepartamento de Química, Universidade de Évora. ^bCQE, Centro de Química de Évora.

^cICAAM, Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas

jmsa@uevora.pt

Alguns estudos relatam a capacidade de cogumelos do tipo *White Rot Fungi* para sintetizar diferentes complexos proteína-polissacárido com propriedades antitumorais e immunoestimuladoras. Alguns polissacáridos produzidos por *Pleurotus spp.*, nomeadamente proteoglicanos, apresentam grande importância como modificadores de resposta biológica (BRMs), estimulando o sistema imunitário do hospedeiro e exercendo inúmeras actividades imunofarmacológicas, em particular actividade antitumoral, com inibição de metastases e estimulação da hematopoiese (Sarangi *et al.*, 2006; Gern *et al.*, 2008).

Em estudos anteriores avaliou-se a produtividade de complexos proteína-polissacárido intra e extracelulares (IPS e EPS) em culturas de *P. ostreatus* utilizando várias fontes de carbono (Arteiro *et al.*, 2008). A produção destes complexos foi máxima no 14º dia de cultura e a utilização de resíduos agro-industriais, permitiu a produção de compostos EPS e IPS inovadores.

Neste trabalho foi avaliada a actividade biológica dos complexos produzidos em culturas líquidas efectuadas com resíduos de girassol. Estudou-se a toxicidade dos extractos EPS e IPS em culturas de *Artemia salina* e as suas propriedades antioxidantes pelos métodos do DPPH e β -caroteno/ácido linoleico. Avaliou-se também o efeito protector dos compostos na hemólise dos eritrócitos e na formação de metahemoglobina, utilizando um modelo de stress induzido pelo cobre, *in vitro*. Os EPS e IPS foram separados por SEC-UV-RI-HPLC utilizando uma coluna de exclusão molecular. Os resultados mostraram que os extractos produzidos apresentam 3 compostos maioritários na fracção EPS e 4 compostos na fracção IPS. Estes extractos não apresentaram toxicidade, com valores de mortalidade de *Artemia salina* inferiores a 5%. Os extractos apresentaram actividade antioxidante, pelos dois métodos complementares estudados, radical livre DPPH e inibição da peroxidação lipídica, mostraram ainda um efeito protector no stress oxidativo das membranas do eritrócito e na redução da síntese de metahemoglobina. Os extractos EPS e IPS produzidos são uma importante fonte de compostos bioactivos com potencial valor medicinal. Dado o interesse destes produtos continuamos os estudos da sua bioactividade.

Referências:

- Gern, R., Wisbeck, E., Rampinelli, J., Ninow, J., Furlan, S. (2008). *Bioresource Technology*, 99, 76–82.
- Sarangi, I., Ghosh, D., Bhutia, S., Mallick, S., Maiti, T. (2006). *International Journal of Immunopharmacology*, 6, 1287–1297.
- Arteiro, J M; Martins, M R; Salvador, C; Candeias, F B; Martins, S; Karmali, A; Caldeira, AT (2008). Proceedings of the 10th International Chemical and Biological Engineering, ISBN: 978-972-97810-3-2. pp 2001-2006.

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

Produção e purificação de Amidases por uma estirpe mutante de *Pseudomonas aeruginosa*

JM Arteiro^{a,b}, C Salvador^a, I Figueiredo^a, F. Candeias^{a,c}, R Vieira^a,
MR Martins^{a,c}, AT Caldeira^{a,b}

^aDepartamento de Química, Universidade de Évora, ^bCQE, Centro de Química de Évora.

^cICAAM, Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas

jmsa@uevora.pt

A amidase microbiana (acilamida amidohidrolase, EC 3.5.1.4) é um enzima intracelular que promove a hidrólise de amidas, com produção do ácido correspondente e iões amónio. Este enzima apresenta inúmeras aplicações biotecnológicas; em particular no domínio da neurobioquímica, na fisiologia das plantas, na medicina, na desintoxicação de efluentes industriais contendo amidas tóxicas e na indústria alimentar e de detergentes (Cravatt *et al*, 1996; Fournaud *et al*, 1998). Este trabalho teve como principais objectivos avaliar o perfil de produção e purificação da amidase produzida pela estirpe mutante de *Pseudomonas aeruginosa* L10. As culturas foram realizadas em bioreactor durante 32 h a 37°C, 250 rpm. A actividade enzimática da amidase foi determinada por um método potenciométrico directo, usando um eléctrodo de ião-selectivo (ISE), de modo a quantificar o amónio libertado pela hidrólise da acetamida. A purificação da amidase foi realizada por cromatografia de afinidade numa coluna com Sepharose 6B epoxi-activada contendo acetamida. A amidase produzida foi comparada com a amidase comercial de *P. aeruginosa* (Sigma A 6691) e a pureza das fracções activas foi confirmada por SDS-PAGE. A massa molecular foi determinada por PAGE-nativa e confirmada por cromatografia de exclusão molecular (SEC) acoplado a um sistema de UV-HPLC.

Os resultados obtidos mostraram que a actividade enzimática foi máxima às 25 h de cultura, correspondentes à fase estacionária. Na separação por cromatografia de afinidade foi possível separar 3 fracções proteicas, sendo a fracção 2 (eluída aos 80 mL) correspondente à amidase. As células imobilizadas em alginato de cálcio apresentaram uma boa capacidade catalítica e possibilidade de reutilização. Estão em curso estudos de imobilização utilizando diferentes matrizes, tendo em vista a formação de películas estáveis que permitam o desenvolvimento de um biosensor.

Cravatt, B.F., Giang, D.K., Mayfield, S.P., Boger, D.L., Lerner, R.A., Gilula, N.B. (1996). Molecular characterization of an enzyme that degrades neuromodulatory fatty-acid amides. *Nature*, 384, 83-87.
Fournaud, D., Vaysse, L., Dubreucq, E., Arnaud, A., Galzy, P. (1998). Monohydroxamic acid biosynthesis. *Journal of Molecular catalysis B: Enzymatic*, 5, 207-211.

Agradecimentos: Este trabalho foi financiado pelo projecto: PTDC/AGR/AAM/73460/2006 da FCT.

Propriedades antioxidantes de complexos proteína-polissacárido produzidos em culturas de *Coriolus versicolor*

C Salvador^a, AT Caldeira^{a,b}, A Terrasso^a, R Ribeiro^a, MF Candeias^{a,c}

JM Arteiro^{a,b} MR Martins^{a,c}

^aDepartamento de Química, Universidade de Évora, ^bCQE, Centro de Química de Évora.

^cICAAM, Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas.

jmsa@uevora.pt

Diversas espécies de cogumelos comestíveis têm sido referidas como fonte de compostos, nomeadamente complexos proteína-polissacárido, com propriedades terapêuticas (Cui *et al.*, 2007; Li *et al.*, 2008). Neste trabalho efectuaram-se culturas de *Coriolus versicolor* em meio líquido utilizando diversas fontes de carbono: glucose, sacarose, maltose, manitol e repiso de tomate. Avaliou-se o perfil de produção de complexos proteína-polissacárido extra e intracelulares (EPS e IPS) durante 14 dias de cultura e algumas propriedades antioxidantes destes extractos.

A concentração de IPS e EPS produzida foi máxima nas culturas efectuadas com repiso de tomate. Todas as culturas de *C.versicolor* produziram compostos com actividade antioxidante avaliada pelo método do DPPH, no entanto, as culturas contendo este resíduo agro-industrial, como fonte de carbono, foram as que produziram maior quantidade destes compostos (inibição >40% para EPS e >36% para IPS). Os extractos de EPS e IPS destas culturas foram também os que apresentaram valores mais elevados de SOD, seguidos das culturas em glucose. As propriedades antioxidantes observadas nas culturas de *C.versicolor* sugerem que culturas submersas deste Basidiomiceto poderão ser uma importante fonte de compostos bioactivos com potencial valor medicinal. Este processo permite também valorizar a utilização de resíduos agro-industriais, com um baixo custo e elevada produção. As diferentes concentrações de EPS e IPS produzidas nas culturas de tomate sugerem que esta estirpe de *C.versicolor* pode produzir diferentes complexos, pelo que estudos futuros serão realizados no sentido de isolar e identificar estes diferentes compostos e avaliar outras propriedades biológicas, nomeadamente antitumorais.

Cui, J., Goh, K., Archer, R., Singh, H. (2007). Characterisation and bioactivity of protein-bound polysaccharides from submerged-culture fermentation of *Coriolus versicolor* Wr-74 and ATCC-20545 strains. *J Industrial Microbiology & Biotechnology*, 34, 393–402.

Li, S., Wang, D., Tian, W., Wang, X., Zhao, J., Liu, Z., Chen, R. (2008). Characterization and anti-tumor activity of a polysaccharide from *Hedysarum polybotrys* Hand.-Mazz. *Carbohydrate Polymers*, 73, 344–350.

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

Efeito dos extractos de *Cynara cardunculus* na regulação do ciclo celular, no processo de hepatocarcinogenese

F Costa^a, A Guerra^a, P Ramos^a, Z Velez^a, O Guerreiro^a, T Silva^b,
AT Caldeira^c, M Duarte^a

^aCentro de Biotecnologia Agrícola e Agro-Alimentar do Baixo Alentejo e Litoral (CEBAL)/IPB,

^bLaboratório Nacional de Energia e Geologia (LNEG), ^cCentro de Química da Universidade de Évora, filipa_tsac@hotmail.com

O carcinoma hepatocelular (HCC) trata-se de um tipo de tumor altamente maligno, com uma previsão média de vida muito reduzida, em que os tratamentos disponíveis, nomeadamente transplante hepático, cirurgia seguida de quimioterapia são relativamente pouco eficazes. Sendo necessário o desenvolvimento de novas terapias onde a prevenção parece ser um tratamento adjuvante com especial relevo. É neste contexto que muitos compostos fitoquímicos têm já uma reconhecida função oncoprotectora, devido às suas propriedades farmacológicas.

A planta *Cynara cardunculus* (Cc), vulgarmente designada por cardo, encerra em si um manancial de diferentes compostos bioactivos, entre eles os flavenóides (derivados estruturais da apigenina e da luteolina), a cinarina (ácido 1,5-O-dicafeoilquinico), as cumarinas e os esteróis. Uma propriedade proeminente destes fitonutrientes é a sua capacidade antioxidante, que confere protecção contra o stress oxidativo, bem como uma reconhecida actividade hepatoprotectora, hipolipidémica e hipocolesterolémica.

Apesar de todas estas propriedades biológicas, na realidade o papel que estes extractos podem desempenhar a nível celular e molecular têm sido muito pouco estudados. Assim, com este trabalho pretende-se investigar a actividade biológica dos extractos derivados de Cc na regulação do ciclo celular em células de hepatocarcinoma humano. Para tal será analisado tanto a nível do mRNA como a nível proteico o efeito de extractos de Cc na expressão de dois conhecidos marcadores do ciclo celular, p21 e p27. Seguidamente, será realizado o estudo por citometria de fluxo, do efeito dos extractos, em células de hepatocarcinoma humano (HepG2), na regulação das diferentes fases do ciclo celular.

Para este trabalho escolhemos o extracto da folha de cardo cultivado fresco (FCF), uma vez que possui uma maior concentração em compostos fenólicos do que os extractos dos restantes órgãos desta planta. De acordo com os resultados obtidos por RT-PCR, podemos verificar um aumento da expressão dos marcadores p21 e p27, em células HepG2 incubadas com 200 µg/mL de FCF. De acordo com resultados preliminares obtidos por citometria de fluxo, constata-se que células HepG2 incubadas pelo período de 48h, com o extracto FCF apresentam um aumento significativo da quantidade de células em fase G₁, e simultaneamente uma diminuição das fases S e G₂. Estes resultados parecem sugerir que o extracto de *Cynara cardunculus*, obtido de folhas de plantas frescas cultivadas, apresenta a capacidade biológica de induzir uma resposta anti-proliferativa, com subsequente paragem do ciclo celular, em células de hepatocarcinoma humano.

Caracterização molecular da actividade de extractos de *Cynara cardunculus* na via de sinalização do PI3K/AKT/mTOR utilizando um modelo *in vitro* de hepatocarcinogénese

A Guerra^{1,2}, F Costa^{1,2}, P Ramos¹, Z Velez¹,
O Guerreiro¹, AT Caldeira², MR Martins², M Duarte¹

¹*Centro de Biotecnologia Agrícola e Agro-Alimentar do Baixo Alentejo e Litoral (CEBAL)/IPB,*

²*Departamento de Química, Universidade de Évora, angela.guerra@cebal.pt*

Cynara cardunculus (Cc), vulgarmente designada por cardo, é uma planta rica em diferentes fitoquímicos nomeadamente compostos fenólicos. De acordo com a literatura, alguns destes compostos possuem uma reconhecida actividade biológica, destacando-se a capacidade antioxidante e anti-tumoral.

O carcinoma hepatocelular (HCC) é o terceiro tumor mais frequente em todo o mundo, resistente à quimioterapia convencional com poucas opções terapêuticas efectivas e com um prognóstico muito desfavorável. Entre os vários mecanismos de sinalização molecular envolvidos no processo de hepatocarcinogénese, a via PI3K/AKT/mTOR destaca-se pela sua importância em diferentes mecanismos, nomeadamente a regulação do ciclo celular, apoptose, diferenciação e proliferação.

Resultados anteriores da nossa equipa demonstram a grande heterogeneidade bioquímica entre os diferentes tecidos de Cc cultivada *versus* selvagem (caules, folhas e flores), de onde extractos da folha e caule cultivado frescos parecem ser os mais promissores em termos de actividade anti-tumoral.

Nesta perspectiva, pretende-se caracterizar molecularmente a actividade destes extractos na via de sinalização do PI3K/AKT/mTOR, em células de HCC. Inicialmente serão analisados os níveis de expressão das distintas isoformas do PI3K (α , β , γ), na presença dos extractos, em células HepG2. Será também estudado o efeito dos extractos na inibição da via do PI3K, a nível proteico, comparando os níveis de fosforilação de diferentes marcadores, nomeadamente, AKT e mTOR, em comparação com inibidores comerciais específicos (LY294002).

Resultados preliminares mostram que células de HCC incubadas, durante 48h, com extractos de Cc mostram uma remissão na proliferação celular, nomeadamente em extractos de folha cultivada fresca (FCF) e caule cultivado fresco (CCF). A nível da expressão das diferentes isoformas, a presença dos referidos extractos parece alterar a quantidade de mRNA presente nas células HepG2.

Valorização da biomassa lenhocelulósica: Estudos de sacarificação enzimática de resíduos de polpa de azeitona

SAC Sengo^{1,2}, MC Fernandes¹, AT Caldeira², PM Lourenço³

1 CEBAL Centro de Biotecnologia Agrícola e Agro-Alimentar do Baixo Alentejo e Litoral

Susana.Sengo@cebal.pt

2 UE Universidade de Évora, Escola de Ciências e Tecnologia, Departamento de Química

3 UCASUL União de Cooperativas Agrícolas UCRL

O resíduo da polpa da azeitona (RPA) é um material com características lenhocelulósicas disponível na região do Alentejo que poderá ser valorizado pela produção de etanol, sendo a sacarificação da celulose por via enzimática um processo essencial neste contexto. A utilização de enzimas celulolíticos tem-se revelado bastante atractiva na sacarificação de diversos materiais lenhocelulósicos, tornando necessária, no entanto, a optimização da sua actividade enzimática para obtenção de polissacáridos fermentescíveis de um modo economicamente viável. As características químicas previsíveis do RPA, nomeadamente a sua riqueza em fenóis, tornam este material algo diferente da maioria dos materiais que estão descritos na literatura como utilizáveis para esta finalidade, especialmente palhas e madeira. Tendo isto em perspectiva, pretende-se averiguar a influência da fracção não-lenhocelulósica do RPA sobre a eficiência da sacarificação enzimática.

Neste trabalho utilizou-se um consórcio enzimático de celulases (CEC) que foi caracterizado por técnicas electroforéticas (PAGE nativa) e cromatográficas (SEC-UV-RI-HPLC) e efectuou-se um estudo de optimização da actividade do CEC, tendo em conta o efeito de inibição produzido pelos compostos fenólicos presentes nas águas de lavagem do resíduo. Os resultados dos ensaios enzimáticos foram analisados por espectrometria de absorção molecular e RI-HPLC, por quantificação dos produtos formados.

Os resultados mostraram que o consórcio enzimático apresenta uma combinação de três proteínas maioritárias, cuja actividade obtida sob o substrato celulose foi de 41,57 FPU/mL. Os resultados do estudo da inibição da actividade pelos compostos fenólicos presentes nas águas de lavagem do resíduo mostram uma influência limitada desta sobre a actividade do CEC.

Valorização biotecnológica de águas ruças em culturas de *Lentinula edodes*

A Catarina^a, J Arteiro^{a,b}, AT Caldeira^{a,b}

^a Departamento de Química, Universidade de Évora. ^b CQE, Centro de Química de Évora.
jmsa@uevora.pt

A indústria de obtenção de azeite, com elevado interesse económico no Alentejo, está associada à produção de águas residuais com elevado CQO. A presença de fenóis nesta carga orgânica origina um problema ambiental de elevada dimensão. Os custos económicos, associados ao problema ambiental, não têm sido resolvidos, daí que a aplicação da legislação ambiental tem sido por enquanto adiada e têm sido encorajados protocolos de investigação no sentido da valorização deste resíduo.

Até agora, a investigação científica tem apresentado algumas soluções com impacto económico elevado para as explorações dos lagares, pelo que, ao nível da dimensão da exploração real, a remoção eficiente do conteúdo de CQO da água ruça pelos processos físico-químicos e biotecnológicos existentes não funciona.

A presença de fenóis na carga orgânica das águas ruças tem sugerido a sua utilização para a produção de compostos de valor acrescentado, tais como enzimas. Diversos microrganismos especialmente fungos da classe dos Basidiomicetos têm sido utilizados esse sentido. As espécies fúngicas *Lentinula edodes*, *Trametes versicolor* e *Pleurotus ostreatus*, têm sido referidas em diferentes estudos como sendo transformadoras de compostos orgânicos com fenóis para a produção do enzima lacase, com elevado interesse industrial.

Neste trabalho pretende-se estudar a capacidade de remoção de compostos fenólicos presentes nestes resíduos, em culturas submersas de Basidiomicetos e simultaneamente produzir o enzima lacase, como produto de valor acrescentado. O impacto da diminuição de compostos fenólicos diminuirá a fitotoxicidade destas águas residuais e permitirá a sua utilização na agricultura.

As amostras utilizadas neste estudo foram recolhidas do lagar de Monte Trigo “Olivais Sul”. As águas ruças recolhidas foram caracterizadas no que concerne ao valor de CQO, fenóis totais, pH e dos metais sódio, potássio, cobre, zinco e ferro, para avaliação da carga poluente.

Os resultados das culturas de *Lentinula edodes*, efectuadas em águas ruças suplementadas, mostraram uma elevada capacidade de remoção do CQO e de fenóis totais, por este fungo. Os estudos prosseguem com vista à optimização do processo de crescimento de *L. edodes* em cultura submersa, utilizando como substrato principal as águas ruças, para a produção de lacase.

D’Annibale, Casa A. R., Pieruccetti F., Ricci M., Marabottini R. (2004). *Lentinula edodes* removes phenols from olive-mill wastewater: impact on durum wheat (*Triticum durum* Desf.) germinability. *Chemosphere* 54: 887–894.

Aggelisa, G., Iconomoub, D., Christouc, M., Bokasa, D., Kotzailiasa, S., Christoua, G., Tsagoua, V., Papanikolaou, S. (2003) Phenolic removal in a model olive oil mill wastewater using *Pleurotus ostreatus* in bioreactor cultures and biological evaluation of the process. *Water Research* 37: 3897–3904.

Tsioulpas A., Dimou D. Iconomou, D., Aggelis G. (2002). Phenolic removal in olive oil mill wastewater by strains of *Pleurotus* spp. in respect to their phenol oxidase (laccase) activity. *Bioresource Technology* 84 (2002) 251–257

Agradecimentos: Este trabalho é financiado pelo Departamento de Química e pelo projecto ALTERCEXA (Departamento de Engenharia).

Bisfosfonatos Derivados do Indazole: Síntese e Avaliação da Actividade Biológica

G Matias,^a FC Teixeira,^b MR Martins,^{a,c} AT Caldeira,^{a,d} APS Teixeira^{a,d}

^aDepartamento de Química, Universidade de Évora, ^bLNEG-UPCH, Estrada do Paço do Lumiar, Lisboa, ^cICAAM - Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas, Universidade de Évora, ^dCQE, Centro de Química de Évora, Universidade de Évora
apsteix@uevora.pt

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. Estes compostos caracterizam-se por serem potentes inibidores dos osteoclastos, promovendo uma diminuição da reabsorção óssea.

Recentemente, tem sido estudada a actividade antitumoral dos BPs, quer a nível das metástases ósseas, mas também no cancro da próstata e da mama. Os bisfosfonatos apresentam ainda actividade contra diversos microrganismos e protozoários, incluindo o *Trypanosoma cruzi* e o *Plasmodium falciparum*.

Os bisfosfonatos (BPs) são análogos do pirofosfato, onde o oxigénio do grupo P-O-P foi substituído por um átomo de carbono, resultando na estrutura P-C-P, metabolicamente mais estável. A estrutura do grupo ligado ao grupo bisfosfonato tem uma grande influência na sua actividade terapêutica; o aumento da potência destes fármacos tem sido conseguida com a introdução de cadeias contendo um átomo de azoto ou cadeias com um anel com 1 ou 2 átomos de azoto.

Neste trabalho efectuou-se a síntese de diversos bisfosfonatos derivados do indazole substituído em diversas posições do anel e com cadeias laterais de diferentes tamanhos. Estes bisfosfonatos foram sintetizados a partir dos ácidos carboxílicos correspondentes, os quais foram transformados nos respectivos cloretos de ácido, seguida da adição de tris(trimetilsilil)fosfito e metanólise.

Os compostos sintetizados foram submetidos a testes de actividade biológica, nomeadamente, avaliação da toxicidade em *Artemia salina* e a ensaios de avaliação da actividade antioxidante pelo método do 2,2-difenil-1-picril-hidrazil (DPPH) e β -caroteno / ácido linoléico.

Agradecimento: À FCT (FEDER, POCI) pelo financiamento concedido (POCI/QUI/55508/2004 e PPCDT/QUI/55508/2004).

Actividade Biocida do Óxido de Etileno em Dispositivos Médicos

A Silveira^a, AT Caldeira^{a,b}, APS Teixeira^{a,b}

^aDepartamento de Química, Universidade de Évora.

^bCQE, Centro de Química de Évora, Universidade de Évora.

apsteix@uevora.pt

O óxido de etileno é um agente químico de grande eficiência no que respeita à esterilização de dispositivos médicos, actuando mesmo em baixas temperaturas o que representa uma vantagem na esterilização de materiais termossensíveis. Por outro lado, o facto do óxido de etileno ser um agente de esterilização gasoso favorece a penetração nos mais diversos dispositivos médicos, independentemente da sua espessura, comprimento ou forma.

O processo de esterilização através do óxido de etileno deve cumprir com a legislação em vigor, nomeadamente as normas ISO 11135-1:2007; NP EN ISO 14937:2003, ISSO 14001:2004, NP 1796:2007, Portaria 80/2006 de 23 de Janeiro e Decreto-Lei n.º 78/2004 de 3 de Abril.

Neste trabalho pretende-se estudar os principais factores de contaminação a que os dispositivos médicos produzidos e embalados na empresa Medirm estão sujeitos, com vista à implementação de um centro de esterilização por óxido de etileno na própria empresa. A Medirm é uma empresa que produz e embala diversos dispositivos médicos, entre os quais, material de gaze, material em não tecido, material em metal e em plástico.

A monitorização da contaminação, efectuada neste estudo, inclui a determinação da carga microbiana dos manipuladores, das superfícies, da qualidade do ar, da matéria-prima e do produto, antes da esterilização. Foram avaliados os parâmetros de maior relevância na esterilização de dispositivos médicos: a presença de *E. coli*, de *Staphylococcus sp.* e de microrganismos totais a 30°C, nos manipuladores, e de microrganismos viáveis ou microrganismos totais a 30°C, bolores e leveduras, nas matérias-primas, nos produtos, nas superfícies e no ar.

De acordo com os resultados obtidos verificamos que é possível identificar manipuladores e zonas do corpo (axila direita) com uma maior carga microbiana e uma variação da contaminação em função das condições meteorológicas de amostragem

Agradecimento: à empresa Medirm, por permitir o desenvolvimento deste projecto

Produção de antibióticos lipopeptídicos por *Bacillus* spp.

LC Dias^a, DM Teixeira^{a,b,c} AT Caldeira^{a,d}

^aDepartamento de Química, Universidade de Évora.

^b ICAAM, Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais Mediterrânicas.

^cLaboratórios HERCULES, Universidade de Évora.

^dCQE, Centro de Química de Évora.

atc@uevora.pt

Os *Bacillus* spp. produzem uma grande diversidade de metabolitos secundários. Em condições de “stress” ambiental podem ser induzidas várias respostas por estes microrganismos, nomeadamente: esporulação, síntese de enzimas extracelulares e produção de antibióticos. Várias estirpes de *Bacillus subtilis* e de *Bacillus amyloliquefaciens* produzem antibióticos cíclicos, de origem peptídica (<2000 Da) sintetizados fora dos ribossoma, por complexos multienzimáticos, entre os quais a classe dos compostos iturínicos, que apresenta forte actividade antifúngica. Ensaio prévios desenvolvidos no nosso laboratório revelaram que algumas estirpes de *Bacillus* isoladas de *Quercus suber* são produtoras de antibióticos lipopeptídicos inovadores, com actividade antifúngica contra diversos fungos contaminantes de produtos florestais. Por outro lado, alguns antibióticos lipopeptídicos têm atraído especial atenção, devido às relevantes actividades biológicas e farmacológicas que apresentam, nomeadamente anti-tumorais.

Neste trabalho efectuaram-se culturas descontínuas de três estirpes de *Bacillus* sp. e avaliou-se a capacidade de produção de lipopéptidos destes microrganismos em culturas de 24 e 48h.

As taxas específicas de crescimento dos microrganismos foram de $0.54h^{-1}$, $0.36h^{-1}$ e $0.29h^{-1}$ para os *Bacillus* sp.1, sp.2 e sp.3, respectivamente. Nos caldos de cultura, livres de células, foi possível identificar por LC-ESI-MS agrupamentos de picos característicos dos lipopéptidos (entre 700-1500 Da). Os resultados obtidos mostram a presença de lipopéptidos em todas as culturas destes microrganismos, contudo, a estirpe *Bacillus* sp.2 parece ser a mais vantajosa na produção destes compostos. A realização de experiências de MS², no modo SIM, permitiu quantificar os lipopéptidos produzidos por cada estirpe, tendo sido obtidas maiores áreas dos picos cromatográficos para a estirpe *Bacillus* sp.2.

Este trabalho insere-se no estágio curricular de uma aluno do primeiro ciclo de Bioquímica, a decorrer no Departamento de Química.

Avaliação da capacidade de depuração de efluentes agrícolas por um sistema biológico

EC Mestrinho^a; L Dias^a; Z Lopes da Silva^a, AP Carvalho^{a,c}; DM Teixeira^{a,b},
AV Dordio^{a,c}, AP Pinto^{a,b}

^aDepartamento de Química, ^bICAAM - Instituto de Ciências Agrárias Ambientais e Mediterrâneas,
^cIMAR – Instituto do Mar, ^dCentro de Química de Évora.
Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho 59, 7000-671 Évora, Portugal
app@uevora.pt

Várias classes de pesticidas têm sido usadas nas últimas décadas para combater um grande número de pragas e doenças e a consequente perda de produção das culturas. Contudo, estes compostos e os respectivos resíduos, podem contaminar águas superficiais e subterrâneas como resultado da sua elevada persistência ambiental. Assim, o trabalho que esta equipa se propõe realizar será o de avaliar a eficiência de novas técnicas para quantificação e remoção de fitofármacos em efluentes agrícolas, através de uma tecnologia inovadora sustentada pela empresa BayerCropScience. Com este objectivo serão desenvolvidas técnicas analíticas adequadas para extrair e monitorizar os pesticidas seleccionados, durante o período de um ano, no sistema biológico patenteado.

A monitorização destes fármacos será realizada utilizando técnicas analíticas como a cromatografia líquida de elevada eficiência (HPLC), com detecção por *diode array* (HPLC-DAD) acoplada a espectrometria de massa (LC-MS).

A poluição de águas e solos por poluentes orgânicos.

Um problema actual.

AP Pinto^{a,b}, AV Dordio^{a,c}, AP Carvalho^{a,d}, DMTeixeira^{a,b}

^aDepartamento de Química, ^bICAAM - Instituto de Ciências Agrárias Ambientais e Mediterrâneas, ^cIMAR – Instituto do Mar, ^dCentro de Química de Évora.
Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho 59, 7000-671 Évora, Portugal
app@uevora.pt

Os fármacos de origem Humana e/ou veterinária são um grupo de poluentes emergente nos últimos anos em todo mundo. Este grupo inclui antibióticos, anti-inflamatórios, β - bloqueadores, hormonas, promotores de crescimento, anestésicos, entre outros. O desenvolvimento, nas últimas décadas, de novas técnicas analíticas muito sensíveis permitiu a sua detecção em pequenas quantidades em solos, águas superficiais e águas subterrâneas (normalmente muito abaixo dos $\mu\text{g L}^{-1}$ em águas e dos $\mu\text{g Kg}^{-1}$ em solos). No entanto, pouco se sabe sobre os efeitos que estes compostos e seus metabolitos, mesmo presentes em quantidades mínimas, poderão ter nos organismos vivos, ecossistemas e saúde humana. Este desconhecimento é ainda mais preocupante se for considerado o seu efeito cumulativo e interactivo com outros poluentes, na cadeia alimentar e nas águas de consumo humano. A questão que se coloca é: “quais serão os efeitos a longo prazo, da ingestão diária destes *cocktails diluídos* de pesticidas, antibióticos, analgésicos entre outros?” Uma vez que a ciência ainda não consegue responder a esta questão, a única solução para este problema será a prevenção. Assim, a detecção, quantificação e desenvolvimento de novas estratégias de remoção deste tipo de compostos em matrizes ambientais sólidas e líquidas é actualmente um desafio pertinente, sendo um dos objectivos da linha de investigação “*Química Ambiental / Fitoremediação*”, desenvolvida no Departamento de Química da Universidade de Évora.

Remoção de Fármacos de Águas Contaminadas com Leitos Construídos de Macrófitas

CM Correia^a, MC Silva^a, EC Mestrinho^a, Z Lopes da Silva^a, AP Carvalho^{a,d};
AP Pinto^{a,b}, DM Teixeira^{a,b}, AV Dordio^{a,c}

^aDepartamento de Química, ^bICAAM - Instituto de Ciências Agrárias Ambientais e
Mediterrâneas, ^cIMAR – Instituto do Mar, ^dCentro de Química de Évora.
Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho 59, 7000-671 Évora, Portugal
app@uevora.pt

A qualidade da água é uma das grandes preocupações actuais em química analítica ambiental. Em particular, a ocorrência e destino de fármacos no ambiente aquático tem vindo a ser reconhecido como um dos problemas emergentes nesta área. De facto, muitas destas substâncias acabam por ser descarregadas juntamente com os efluentes das ETARs nos meios receptores hídricos como consequência da geralmente baixa eficiência de remoção destes contaminantes pelos processos de tratamento convencionais utilizados na maioria das estações de tratamento. As implicações resultantes da descarga de fármacos no ambiente aquático tornam urgente a necessidade de encontrar processos complementares ou alternativos para a sua remoção dos efluentes. Recentemente, processos de fitorremediação como os leitos construídos de macrófitas (LCMs) têm surgido como sistemas complementares ou, nalguns casos, alternativos de tratamento de águas residuais urbanas. Estes sistemas de tratamento têm-se mostrado particularmente eficientes na remoção de alguns poluentes orgânicos xenobióticos tais como pesticidas, explosivos, hidrocarbonetos, entre outros.

Os mecanismos de tratamento nos LCMs são extremamente diversificados, caracterizando-se por uma interacção complexa de processos físicos, químicos e biológicos, que ocorrem ao nível das plantas, da matriz de suporte e dos microrganismos adaptados à toxicidade do efluente. A eficiência de remoção dos poluentes nos LCM pode ser significativamente melhorada através de uma selecção criteriosa de matrizes de suporte que possuam uma elevada capacidade para reter contaminantes por sorção, permuta iónica ou outros processos fisico-químicos, e de plantas que revelem uma boa tolerância aos poluentes e capacidade de os removerem de águas contaminadas.

O objectivo principal deste trabalho em desenvolvimento é avaliar a eficiência de remoção de alguns fármacos presentes em efluente doméstico, por microcosmos de leitos construídos de macrófitas. Estes sistemas estão a ser optimizados por selecção prévia de materiais para utilização como matriz de suporte, bem como pela selecção e avaliação da capacidade de algumas macrófitas para tolerar e remover os fármacos estudados.

Neste trabalho são também desenvolvidas e optimizadas metodologias analíticas para a quantificação dos fármacos em diferentes matrizes (águas, efluentes e tecidos vegetais).

Condensação e Evaporação Capilar de Vapores Orgânicos em Materiais Mesoporos Ordenados

PA Russo, MML Ribeiro Carrott, PJM Carrott

*Centro de Química de Évora e Departamento de Química, Universidade de Évora,
Colégio L. A. Verney, 7000-671 Évora, Portugal, manrc@uevora.pt*

A descoberta da família de silicatos mesoporosos ordenados M41S levou a um grande esforço por parte dos investigadores da área dos materiais para preparar novos materiais deste tipo, com poros de diferente tamanho, geometria e composição química, devido às interessantes características estruturais destes sólidos, particularmente áreas superficiais e volumes porosos elevados e poros de tamanho uniforme e ajustável, que os tornam ideais para aplicações em adsorção, catálise ou para estudos fundamentais de adsorção em mesoporos. A maioria dos estudos de adsorção realizados nos novos materiais mesoporosos ordenados envolvem gases a temperaturas baixas, como azoto e argon, enquanto os estudos de adsorção de compostos orgânicos a temperaturas mais elevadas são reduzidos ou inexistentes.

Neste trabalho, apresenta-se o estudo da adsorção de tolueno, metilciclo-hexano, neopentano e n-pentano a diferentes temperaturas em materiais com estrutura mesoporosa ordenada. Os materiais investigados são constituídos por poros com diferente geometria, tamanho e química superficial e incluem sílicas com poros cilíndricos unidireccionais (MCM-41, SBA-15, PHTS), estrutura tridimensional de canais cilíndricos (MCM-48) e poros esféricos com entradas mais estreitas (SBA-16, FDU-12 e MCF); sílicas com grupos clorometilo na superfície e um material híbrido sílica-benzeno; e materiais de carbono com estrutura mesoporosa ordenada (CMK-3, MCF-C). Todos os sólidos foram previamente caracterizados por difracção de raios X e adsorção de azoto a 77 K. Verificou-se que a geometria e a química superficial dos poros afectam a condensação e a temperatura crítica de histerese dos vários adsorptivos orgânicos de forma distinta.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro da Fundação para a Ciência e a Tecnologia (projecto nº PTDC/CTM/67314/2006 e bolsa de doutoramento nº SFRH\BD\17713\2004 (P. A. R.)).

Vias de Síntese de Novas Moléculas e Exploração de Reacções Catalíticas Assimétricas

AJ Burke, VR Marinho, EP Carreiro, CS Marques, PC Barrulas, NC Mota, IE Drumond,
L Fernandes

*Departamento de Química e Centro de Química de Évora, Universidade de Évora, Rua
Romão Ramalho, 59, 7000 Évora, Portugal
ajb@dquim.uevora.pt*

A exploração de novos compostos com possíveis aplicações em variadas áreas de interesse do ponto de vista académico e industrial é uma implementação rigorosa no domínio da química orgânica.

A síntese de novas moléculas, o desenvolvimento de novas vias de síntese para moléculas já conhecidas e a síntese catalítica assimétrica estão na base do trabalho desenvolvido no laboratório de síntese orgânica da Universidade de Évora.

Neste poster será apresentado um plano geral do trabalho realizado no domínio da síntese orgânica de novos compostos, nomeadamente ligandos quirais do tipo P e do tipo N, aplicações dos mesmos em conhecidas reacções catalíticas, tal como estudo o estudo de organocatalizadores que providenciem acesso a produtos enantiomericamente puros.

Referências Bibliográficas:

- [1]. Marques, CS; Burke, AJ; *Eur. J. Org. Chem.*, **2010**, 1639-1643;
- [2]. Marinho, VR; Burke, AJ; *et al*; *Eur. J. Org. Chem.*, **2009**, 36, 6311-6317;
- [3]. Marinho, VR; Burke, AJ; *Synthetic Communications*, **2009**, 39, 4423-4428;
- [4]. Marques, CS; Burke, AJ; *et al*; *J. Phys. Org. Chem.*, **2009**, 22, 735-739;
- [5]. Carreiro EP; Burke, AJ; *et al*; *Tetrahedron: Asymmetry*, **2009**, 20, 1272-1278;
- [6]. Barrulas, PC; Burke, AJ; *et al*; *Synthetic Communications*, **2008**, 38, 1365-1374;

Lead in cork

JC Ponte-e-Sousa*, AM Neto-Vaz**

* *Agricultural Superior School of Elvas – Polytechnic Institute of Portalegre*

* ** *Chemistry Department of the University of Évora*

** *Mediterranean Agricultural and Environmental Sciences Institute*

jcps@uevora.pt

Cork closures for fine wine bottles are made from the production of the most sustainable of all agro-industries, the one known for the continuous conservation of cork oak forests in the western mediterranean basin. The current use of this raw material for closing recipients containing products for human consumption had always posed to all the need to assess its quality. There are a number of studies regarding the Lead content of cork which have never been compared even though from their crossing remarkably information arises. Here are shown facts and trends about how small are cork Lead contents. This shows that the hypothesis of poisoning by Lead (Saturnism) trough cork is unlikely to be verified with such low concentrations as the ones already measured, both by others in the past as by our own team voltammetric study of cork, the first of its kind, but also shown how to create the inverse hypothesis.

ÍNDICE DE AUTORES

A

P	Adriano	P.14	S	Arantes	P.16
I	Alves-Pereira	O.11; P.20	JMS	Arteiro	O.14; O.16; P.21
CM	Antunes	O.04; O.12; P.17; P.18; P.19; P.20			P.22; P.23; P.27

B

PC	Barrulas	P.35	R	Brandão	P.17; P.18
AF	Bella	O.03	AJ	Burke	O.03; P.35

C

AT	Caldeira	O.16; P.12; P.21; P.22; P.23; P.24; P.25; P.26; P.27; P.28; P.29; P.30	PJM	Carrott	O.01; O.07; O.13; P.01; P.02; P.03; P.04; P.05; P.06; P.34
M	Calderón	PC.01			
AJ	Candeias	O.08; P.12; P.13; P.14; P.15	AP	Carvalho	P.31; P.32; P.33
M	Candeias	P.20	L	Carvalho	O.08
MF	Candeias	P.21; P.23	JE	Castanheiro	P.07
CS	Caetano	P.07	A	Catarina	P.27
J	Caetano	O.08	FL	Conceição	O.13; P.04
T	Calligaro	P.13	A	Conim	P.20
IPP	Cansado	P.01, O.13	CM	Correia	P.33
J	Capela-Pires	P.20	ACR	Costa	O.12; P.19
A	Carneiro	P.13	F	Costa	P.24; P.25
EP	Carreiro	P.35	J	Cruz Morais	O.10; O.12; P.16; P.19
MLR	Carrott	O.01; O.07; O.13; P.01; P.02; P.03; P.04; P.05; P.06; P.34			

D

CB	Dias	O.08; P.13; P.15	IE	Drumond	P.35
LC	Dias	P.30; P.31	M	Duarte	P.24; P.25
AV	Dordio	P.31; P.32; P.33			

E

G Engo PC.01

F

L	Fernandes	P.35	TA	Ferreira	O.08; P.13; P.15
MC	Fernandes	P.26	R	Ferro	P.18
P	Ferreira	P.07	I	Figueiredo	P.22
RA	Ferreira	O.11; P.20	MT	Figueiredo	O.06a, O.06b

G

C	Galacho	O.01; P.01;P.02	AJF	González	PC.01
M	Gil	P.12	CM	González-García	PC.01
A	Guilherme	O.08	A	Guerra	P.24; P.25
A	Goméz-Landero	PC.01	O	Guerreiro	P.24; P.25
S	Gonçalves	P.20			

H

C Herdes P.03

L

C	Laginhas	O.07; P.06	MC	Lopes	P.13
N	Lima	PC.03; PC.04	ME	Lopes	O.15
B	Ledesma	PC.01	PM	Lourenço	P.26

M

AC	Manhita	P.15	G	Matias	P.28
VR	Marinho	P.35	PJ	Mendes	O.09; O.17; P.08
CS	Marques	P.35	EC	Mestrinho	P.31;P.33
LM	Marques	O.13; P.04	J	Mirão	O.08; P.12; P.13;
MR	Martins	O.10; O.16; P.12; P.16; P.21; P.22; P.23; P.25; P.28	NC	Mota	P.35
			RA	Monteiro	PC.02
SM	Martins	P.09; P.10	PAM	Mourão	O.01; O.07; O.13; P.03; P.05

N

JV	Nabais	O.07; O.13; P.06	A	Nunes	P.01
A	Neto-Vaz	P.36			

P

MF	Paixão	O.06a	S	Pessanha	O.08
V	Paixão	P.12	M	Pinheiro	P.20
GS	Palmeiro	P.10; P.11	F	Pinto	O.16
A	Pereira	P.20	AP	Pinto	P.31; P.32; P.33
AM	Pereira	P.09; P.10; P.11	DS	Pito	P.07
M	Pereira	P.16	JC	Ponte-e-Sousa	P.36

R

A	Ramires	P.06;	J	Robalo	P.03
C	Ramos	P.12	S	Román	PC.01
P	Ramos	P.24; P.25	C	Rosado	P.20
MC	Rayo	PC.01	P	Ruivo	P.20
I	Ribeiro	P.15	PA	Russo	O.01; P.34
R	Ribeiro	P.17; P.23			

S

C	Salvador	O.16; P.21; P.22; P.23	T	Silva	P.24
J	Sampaio	P.21	TJ	Silva	O.17; P.08
C	Santos	PC.03; PC.04	ZL	Silva	P.31; P.33
V	Santos	P.15	A	Silveira	P.29
A	Santos Silva	P.14	MF	Simões	PC.03
SAC	Sengo	P.26	R	Simon	P.13
MC	Silva	P.33	N	Schiavon	P.13
				Suhas	O.07; O.13

T

A	Terrasso	P.21; P.23	FC	Teixeira	P.28
APS	Teixeira	P.28; P.29	JMG	Teixeira	O.02
DM	Teixeira	O.08; P.13; P.15; P.19; P.30; P.31; P.32; P.33			

V

S	Valadas	O.08; P.12; P.14	F	Velho	P.02
H	Vargas	P.15	HM	Vicente	O.05
A	Vázquez	O.06a	E	Vieira	P.20
R	Veiga	P.14	IP	Vieira	P.19
Z	Velez	P.24; P.25	R	Vieira	P.22