36° CLAQ PANAMÁ 2024

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Memorias CLAQ Panamá 2024

36° CLAQ PANAMÁ 2024

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Memorias de

XXXVI Congreso Latinoamericano de Química

XII Congreso Nacional de Química

V Congreso Estudiantil de Química

Business Center - Hotel Sortis Panamá
Ciudad de Panamá, Panamá

30 de septiembre al 4 de octubre de 2024

Auspicia:

FLAQ
Federación Latinoamericana de Asociaciones Químicas

Organiza:

COLEGIO PANAMEÑO DE QUÍMICOS 1974

50 AÑOS 1974 - 2024

Libro de Resúmenes Congreso Latinoamericano de Química, Panamá 2024

Todos los derechos reservados©

Publicado: mayo 2025

Autores:
Víctor Acevedo
Brenda Checa
Jaqueline Jones
Ritzela Lezcano

Editado Por:
Carlos Cedeño
Enero 2025

Ciudad de Panamá, Panamá

Esta publicación cuenta con ISBN N.º 978-9962-8603-0-3.
Registrada y depositada en la Biblioteca Nacional de Panamá “Ernesto J. Castillero R.”
conforme a la Ley 3 del Depósito Legal.

Patrocinadores

Agilent | Authorized Distributor

analytical

SCANCO
Soluciones analíticas para laboratorios

SENACYT
Secretaría Nacional de Ciencia, Tecnología e Innovación

RGH

LAB
Todo para Laboratorios

NORLAB
Mobiliario Técnico Certificado para Laboratorio

UNIVERSIDAD DE PANAMÁ
1935

CENAMEP AIP
Centro Nacional de Metrología de Panamá AIP

CÍA. DISTRIBUIDORA JEMA, S.A.
"Ofrecemos y Servimos sólo lo mejor"
www.cdjemasa.com

Patrocinadores

Agilent | Authorized Distributor

INDICASAT-AIP
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS Y SERVICIOS DE ALTA TECNOLOGÍA AIP

Copa Airlines®

ACS Chemistry for Life®

FLAQ
Federación Latinoamericana de Asociaciones Químicas

PROMED
el proceso de innovar

Índice

Presentación 2
Patrocinadores 4
Presidente Comité Organizador 7
Presidente Comité Científico 8
Presidente CEQUI 9
Comité Organizador 12
Comité Científico 13
Comité Estudiantil 18
Consejo Directivo FLAQ 20
Logos 22
Ceremonia Inaugural 26
Reconocimientos Conferencia Inaugural 31
Asamblea General FLAQ 35
Talleres 40
Visitas Técnicas 48
Premios Mujeres Latinoamericanas en Química 2024 54
Premios Pósters 58
Conferencias Magistrales 63
Mesas Redondas 82
Exposciones Orales 89
Exposiciones Póster 118
Reconocimientos Finales 145
Agradecimiento a Olga R. Lock 151
Anexos 155
Programa Exposiciones Orales 156
Programa Exposiciones de Póster 174
Invitación CLAQ 2026 187

Sean todos bienvenidos:

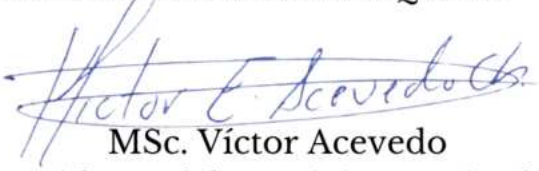
En este año 2024, se celebran los 50 años de fundación del Colegio Panameño de Químicos (COPAQUI), es por esto que durante el Congreso Latinoamericano de Química (CLAQ) 2018, que se realizó en La Habana, Cuba, la delegación de Panamá encabezada por la presidenta del Colegio Panameño de Químicos, Brenda Checa, presentó la petición para realizar el CLAQ 2024 en Panamá. En noviembre del 2022, durante la Asamblea de la Federación Latinoamericana de Asociaciones Químicas (FLAQ), realizada en Rio de Janeiro, Brasil, se aprobó, con votación unánime, que Panamá sea la sede del XXXVI Congreso Latinoamericano de Química. La última vez que se celebró un CLAQ en Panamá fue en 1994, cuando se cumplieron los 20 años de fundación de COPAQUI.

En nombre del comité organizador del XXXVI Congreso Latinoamericano de Química, del XII Congreso Nacional de Química y del V Congreso Estudiantil de Química deseo darles una calurosa bienvenida a Panamá. Una tierra radiante de vida, perfectamente imperfecta y llena de autenticidad. Donde los mundos del Norte y del Sur se conectan, coexisten mundos nuevos y antiguos, y paisajes cosmopolitas conviven en armonía con selvas tropicales salvajes e indómitas.

El comité científico integrado por docentes y profesionales destacados de Panamá, se han esforzado para lograr que las conferencias plenarias, exposiciones orales, posters, talleres y visitas técnicas cumplan con los altos estándares presentados en los CLAQ anteriores. Espero que el CLAQ sea la oportunidad ideal para que los participantes, principalmente los estudiantes, aumenten sus conocimientos, interactúen con los expositores y puedan conocer las investigaciones y experiencias que se dan en los otros países, de ahí surge el lema del congreso: Construyendo Puentes Químicos en América Latina.

Deseo agradecer a los patrocinadores, su apoyo es fundamental para el éxito de este congreso. Gracias a su generosidad, podremos ofrecer un espacio de intercambio de conocimientos, innovación y colaboración en el campo de la química. Con este apoyo se fortalecerá su compromiso con el avance científico y la sostenibilidad en nuestra región.

Por último, agradezco a todo el comité organizador por sacrificar su tiempo de manera voluntaria para que todos los asistentes puedan disfrutar lo que Panamá tiene para ofrecer. Estudiantes, profesores, profesionales, invitados y público en general espero que puedan aprovecha al máximo este CLAQ 2024.



MSc. Víctor Acevedo
Presidente del Comité Organizador
COPAQUI

Estimados participantes:

Es un verdadero honor darles una cordial bienvenida al XXXVI Congreso Latinoamericano de Química 2024. Este año, el congreso tiene un significado especial, ya que no solo celebramos el avance y las contribuciones científicas de nuestra disciplina, sino que también conmemoramos el 50 aniversario de la fundación del Colegio Panameño de Química (COPAQUI) y simultáneamente, se lleva a cabo el Quinto Congreso Estudiantil de Química.

La celebración de este evento en Panamá resulta especialmente significativa, dado el papel estratégico que desempeña el país como Hub regional para la colaboración científica y el intercambio académico, aprovechando su privilegiada posición geográfica y su larga tradición como punto de encuentro entre culturas y saberes.

A lo largo de este congreso, contaremos con una serie de conferencias, talleres, mesas redondas, giras y sesiones de exposición de Pósters que nos permitirán profundizar en temas fundamentales de la química, explorando tanto sus aplicaciones como los desafíos actuales.

Agradezco de una forma especial a los ponentes, quienes han hecho un esfuerzo significativo para compartir su conocimiento con todos nosotros, y a los asistentes, por su participación. Agradezco también a los patrocinadores, a la Universidad de Panamá y a todos los colaboradores que han hecho posible este evento. Sin su apoyo, no habría sido posible llevar a cabo este congreso. Un agradecimiento especial a los miembros del Comité Científico, quienes han trabajado incansablemente para organizar un programa atractivo y de calidad. Su dedicación y compromiso con la ciencia se reflejan en cada detalle de este evento.

Les deseo a todos una experiencia enriquecedora y exitosa. Estoy segura de que juntos podemos seguir impulsando el desarrollo de la ciencia en América Latina, y que este congreso será solo el inicio de nuevas y fructíferas colaboraciones.

Msc. Ritzela Lezcano
Presidente Comité Científico

Estimados Participantes:

Organizar el V Congreso Estudiantil de Química junto al CLAQ fue una experiencia que realmente disfruté. Sé que cada conferencia, taller y exposiciones dejó algo nuevo a los estudiantes participantes, desde ideas y aprendizaje para seguir conociendo y creciendo en esta carrera que es la Química.

Fue emocionante escuchar a expertos y conocer a otros estudiantes que comparten el mismo gusto por la carrera.

Este Congreso me hizo darme cuenta de lo importante que es tener espacios como este. Dónde podamos aprender, compartir y motivarnos mutuamente. Espero de corazón que no se quede solo en un V Congreso, si no que futuras generaciones decidan organizar un VI, VII y que siga creciendo con él tiempo.

Me siento muy agradecida de haber formado parte del Comité Organizador y haber aportado a esta experiencia, la cual estoy segura de que dejó una huella positiva a todos los participantes.

Luisa Casis
Presidenta
V Congreso Estudiantil de Química

Foto Reservada: Luis Quintero de Pexels

F&F Tower / El Tornillo Panamá

Comités

Comité Organizador

Brenda Itzel Checa Orrego

- Presidente del Colegio Panameño de Químicos.
- Magíster en Ciencias Químicas con orientación en Química Analítica.

Victor Acevedo

- Presidente del Comité Organizador del XXXVI Congreso Latinoamericano de Química (CLAQ) 2024.
- Magíster en Ciencias Químicas.

Ritzela E. Lezcano G.

- Profesora Titular - Departamento Química Física FCNET - Universidad de Panamá.
- Presidente CLAQ 2024

Luisa Casis

- Presidenta del V Congreso Estudiantil de Química.
- Estudiante de Química en la Universidad de Panamá.

Yomairy Aikman

- Vicepresidenta del V Congreso Estudiantil de Química.
- Estudiante de Química en la Universidad de Panamá.

Comité Científico

Doctora Cecilia Díaz

- Profesora Titular de Bioquímica, Universidad de Panamá
- Panamá, Panamá

Doctora Aracelly Vega

- Profesora Titular - Universidad Autónoma de Chiriquí
- Directora del Centro de Investigación en Recursos Naturales

Doctora Ariadna Batista

- Profesora Titular - Universidad Autónoma de Chiriquí
- Centro de Investigación de Productos Naturales y Biotecnología (CIPNABIOT)

Doctora Janira Jaen

- Profesora - Departamento de Química Analítica
- FCNET - Universidad de Panamá.

Doctor Mario Luis Miranda

- Profesor - Departamento de Química Analítica
- FCNET - Universidad de Panamá.

Doctor Abdiel Aponte

- Profesor Titular - Departamento Química Física
- FCNET - Universidad de Panamá.

Comité Científico

Doctor Carlos Ríos

- Profesor - Departamento de Química Orgánica
- FCNET - Universidad de Panamá.

Doctor José L. Robinson Duggon

- Profesor Titular - Departamento de Bioquímica
- FCNET - Universidad de Panamá.

Doctor Marcos Salazar

- Profesor - Departamento de Bioquímica
- FCNET - Universidad de Panamá.

Doctor Rafael Vázques

- Department of Chemistry
- Florida State University

Doctor René Araúz

- Profesor Titular- Departamento de Química Inorgánica
- FCNET - Universidad de Panamá.

Doctor Gerardo Corzo Burguete

- Investigador Titular
- Universidad Nacional Autónoma de México

Comité Científico

Doctor Eduardo Chung

- Profesor Titular - Departamento de Física
- FCNET - Universidad de Panamá.

Magister Ana Santana

- Profesora Titular - Departamento de Química Orgánica
- FCNET - Universidad de Panamá.

Magister Jaqueline Jones

- Profesora - Departamento de Bioquímica
- FCNET - Universidad de Panamá.

Magister José María Quintero

- Profesor - Universidad Marítima Internacional de Panamá

Magister Irene Castillero

- Profesora - Departamento de Química Analítica
- FCNET - Universidad de Panamá.

Magister Lourdes Poveda

- Departamento de Calidad y Alimentos
- Empresas Melo S.A.

Comité Científico

M.Sc. Ritzela Lezcano

- Presidente - Comité Científico
- CLAQ 2024

Magister Jorge de Obaldía

- Profesor - Departamento de Química Analítica
- FCNET - Universidad de Panamá.

Magister Nixia Mena

- Estudio de la Salud
- Instituto Conmemorativo Gorgas

Magister Tidiam Santamaría

- Profesora - Departamento Química Física
- FCNET - Universidad de Panamá.

Licenciado Alexie Brenes

- Toxicólogo Forense
- Instituto de Medicina Legal y Ciencias Forenses

Licenciado Felipe Barría

- Profesor - Departamento de Química Analítica
- FCNET - Universidad de Panamá.

Comité Científico

Licenciado Martín de Hoyos

- Universidad de Panamá

Licenciado Jorge González Chan

- Profesor - Departamento de Química Analítica
- FCNET - Universidad de Panamá.

Licenciado Elio Muñoz

- Profesor - Departamento de Bioquímica
- FCNET - Universidad de Panamá.

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA + CIUDAD DE PANAMÁ

Comité Estudiantil

Luisa Casis
Estudiante de la Universidad de Panamá

Yomairy Aikman
Estudiante de la Universidad de Panamá

Luis Arroyo
Estudiante de la Universidad de Panamá

Adriana Rodríguez
Estudiante de la Universidad de Panamá

Edgar Vergara
Estudiante de la Universidad de Panamá

Ginelle Roach
Estudiante de la Universidad de Panamá

Amanda Grimaldo
Estudiante de la Universidad de Panamá

Comité Estudiantil

Yasibeth Solis
Estudiante de la Universidad de Panamá

Thays Rodríguez
Estudiante de la Universidad de Panamá

Nayeli Aguilar
Estudiante de la Universidad de Panamá

Laura González
Estudiante de la Universidad de Panamá

Erik Gavidia
Estudiante de la Universidad de Panamá

Lina Campos
Estudiante de la Universidad de Panamá

Ruth Hurtado
Estudiante de la Universidad de Panamá

Emmanuel Campos
Estudiante de la Universidad de Panamá

Consejo Directivo FLAQ 2022-2024

Doctor Jorge Cardoso Messeder

- Past Presidente
- Instituto Federal do Rio de Janeiro (IFRJ)

Dr. Harold Duban Ardila Barrantes

- Universidad Nacional de Colombia
- Departamento de Quimica

Doctora Olga Lock Sing

- Presidente Honoraria
- Sociedad Química del Perú

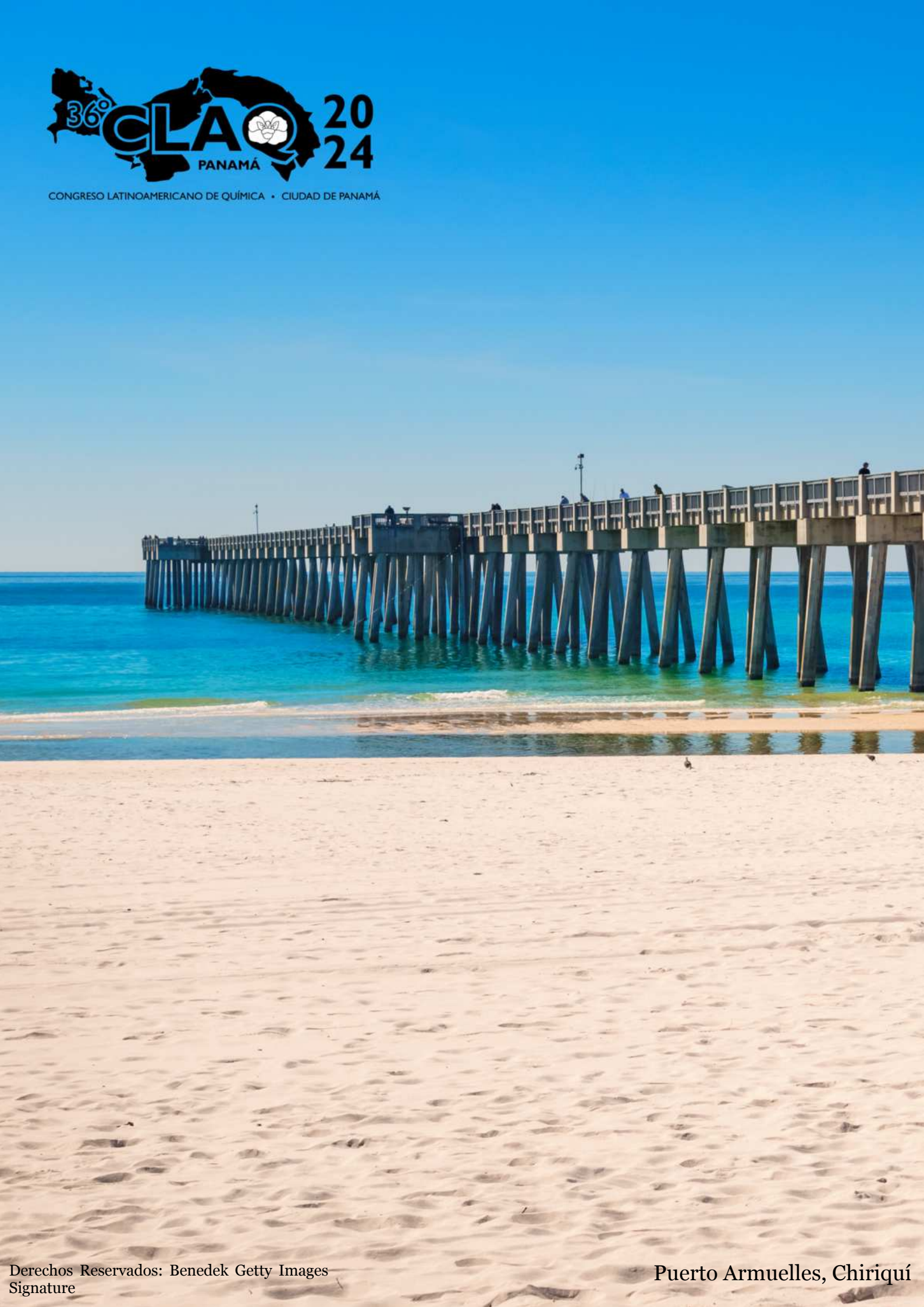
36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Doctor Estevao Freire

- Federal University of Rio de Janeiro | UFRJ
- Ingeniero en Materiales

Ing. Flor de María Sosa Masgo

- Tesorera
- Sociedad Química del Perú



Derechos Reservados: Benedek Getty Images Signature

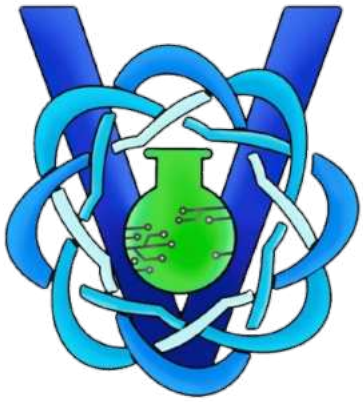
Puerto Armuelles, Chiriquí

Logos

36° CLAQ PANAMÁ 2024

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Del logo se destaca: El azul y el rojo representan los colores de la Bandera Nacional. En la «Q» de Química se muestra la flor nacional, la orquídea del Espíritu Santo (Peristeria elata). La silueta es el mapa de Panamá, en el medio se resalta el Canal de Panamá, lugar donde se unen los dos océanos, el Pacífico y el Atlántico.
Panamá es reconocido como «Puente del mundo y corazón del Universo»



V Congreso Estudiantil de Química 2024

El átomo representa a la ciencia y transmite conocimiento e innovación. La letra «V» por ser el quinto congreso. El matraz redondo coloca a la química como ciencia central. El microchip como referencia a la tecnología. El azul eléctrico representa el cielo profundo y brillante. El celeste representa las nubes. El color verde contiene la tierra que es protegida por la ciencia (química). El gris plateado significa tecnología.

Agilent | Authorized Distributor

INDICASAT-AIP

INSTITUTO DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS Y SERVICIOS DE ALTA TECNOLOGÍA AIP

Contribuyendo al avance de la ciencia en Panamá: INDICASAT-AIP lidera investigación e innovación

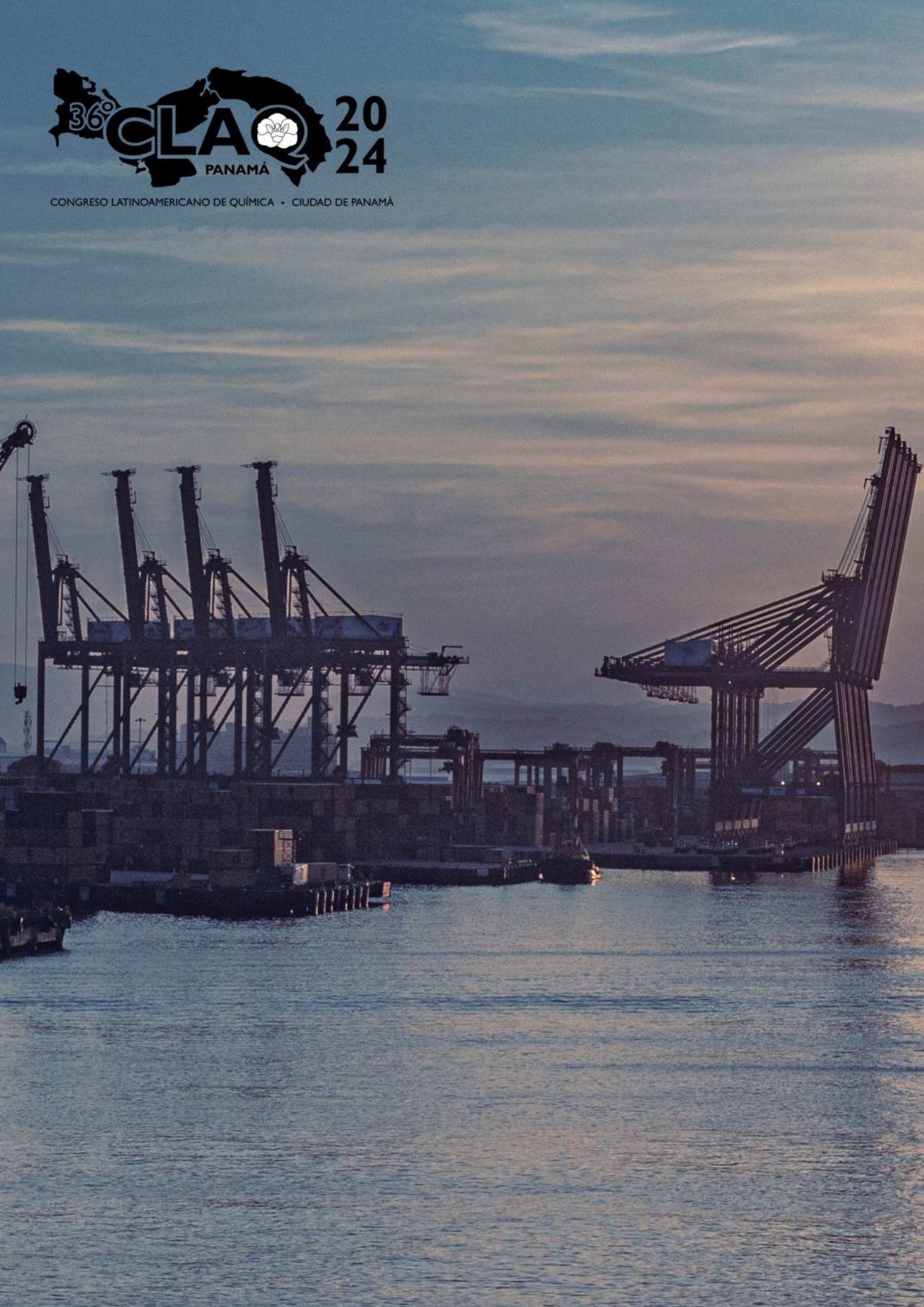
INDICASAT-AIP (Instituto de Investigaciones Científicas y Servicios de Alta Tecnología) se ha consolidado como un referente nacional e internacional en ciencia, innovación y desarrollo tecnológico. Con un enfoque multidisciplinario, el instituto impulsa proyectos de investigación en salud, biotecnología, neurociencia, y ciencias ambientales, contribuyendo de manera significativa a resolver desafíos globales y regionales.

Para conocer más sobre nuestros proyectos e iniciativas, visita: www.indicasat.org.pa.

"Transformamos conocimiento en soluciones para un futuro sostenible"

36° CLAQ PANAMÁ 2024

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ



Ceremonia Inaugural

PROGRAMA

CEREMONIA DE INAUGURACIÓN

XXXVI Congreso Latinoamericano de Química
XII Congreso Nacional de Química
V Congreso Estudiantil de Química

LUNES, 30 Sep. 2024 | 4:30pm
Hotel Sortis
Área Bancaria, Ciudad de Panamá

4:30 APERTURA

Palabras de Bienvenida

4:35PM - 4:50PM

Presentación Promtur Panamá

4:50PM - 5:20PM

Palabras de Autoridades
Acto protocolar CLAQ 2024 / FLAQ

CONFERENCIAS

5:20 PM - 5:40PM

Semiconductores y Microelectrónica -una oportunidad para Panamá
Dra. Elida de Obaldía

5:40PM - 6:00PM

Construyendo un ecosistema de Innovación, caso Espavé Technologies
Dr. Rolando Gittens

6:00PM - 6:20PM

Impacto de los 50 años del Colegio Panameño de Químicos en el desarrollo nacional
Dr. Rafael Vásquez

6:20PM

CÓCTEL DE BIENVENIDA

Palabras de bienvenida por parte del Rector de la Universidad de Panamá Doctor Eduardo Flores Castro

Congreso Latinoamericano de Química
2024
36° CLAQ 2024
PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Reconocimientos
Conferencia Inaugural

Conferencia

Semiconductores y Microelectrónica - una oportunidad para Panamá

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Magister Jaqueline Jones hace entrega a la expositora Doctora Elida de Obaldía

Conferencia

Construyendo un ecosistema de Innovación, caso Espavé Technologies

Magister Ritzela Lezcano hace entrega de reconocimiento al Doctor Rolando Gittens

Conferencia

Impacto de los 50 años del Colegio Panameño de Químicos en el desarrollo nacional

Presidente del CEQUI 2024 Luisa Casis hace entrega de reconocimiento al Doctor Rafael Vásquez

Asamblea General FLAQ

Asamblea General de la Federación Latinoamericana de Asociaciones Químicas

La Federación Latinoamericana de Asociaciones Químicas (FLAQ) es el organismo que representa a las asociaciones científicas y/o profesionales de la Química en las naciones de América Latina. La FLAQ fue fundada en el VII Congreso Latinoamericano de Química, realizado en la ciudad de México del 29 de marzo al 3 de abril de 1959. Dentro de los objetivos de la FLAQ se encuentran: promover los congresos latinoamericanos de química, participar en encuentros globales, incentivar las investigaciones químicas regionales, formar comités especializados y divulgar los avances en química.

En el CLAQ 2024 se realizó la Asamblea General en la que participaron los presidentes o representantes de las siguientes asociaciones/sociedades químicas de América Latina: Colegio Panameño de Químicos, Asociación de Química de Guatemala, Asociación Brasileira de Química, Sociedad Cubana de Química, Colegio de Químicos de Puerto Rico, Sociedad Química del Perú, Sociedad Colombiana de Ciencias Químicas y Sociedad Chilena de Química. Además, participaron Víctor Acevedo (presidente), Jorge Messeder (expresidente), Olga Raida Lock Sing (secretaria ejecutiva) y Flor de María Sosa (tesorera).

Durante la Asamblea General, se discuten temas como: aprobación y propuestas de futuras sedes del CLAQ, adición de nuevas asociaciones, se revisa la correspondencia, se aprueban actividades, se designan a nuevos miembros del consejo directivo y se le da cortesía de sala a otras organizaciones químicas para entablar relaciones con la FLAQ. Este año participó en nombre de la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC) el Dr. Javier García; por parte de la American Chemical Society (ACS) el Dr. Wasiu Lawal y por parte del Consejo Federal de Química (Brasil) el Dr. José de Ribamar Oliveira Filho.

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Asamblea General de la FLAQ

Participantes de la Asamblea General de la FLAQ

Presentación del Dr. Wasiu Lawal (de azul) de la ACS.

Asamblea General de FLAQ junto al
Dr. José de Ribamar Oliveira Filho (azul en el centro).

36º CLAQ 2024
PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Talleres

Taller

Elaboración de preguntas para favorecer la comprensión lectora, oral y escrita, en áreas científicas.

Fecha
Lunes 30 de septiembre de 2024

Facilitadora
Dra. Sandra Patricia Rojas Rojas
Maestría en Docencia de la Química y Doctorado en Ciencia de la Educación
Profesora Asociada e investigadora
Pedagogía en Química y Biología
Departamento Ciencias del Ambiente, Facultad de Química y Biología
Universidad De Santiago de Chile
sandra.rojas.r@usach.cl

Resumen
Centrado en el aporte de las preguntas como motor de propulsión del conocimiento, su avance y eje central del quehacer científico. Se discute cómo aportan al surgimiento de nuevas propuestas y maneras de explicar los fenómenos, así como su papel en la enseñanza y aprendizaje de la ciencia escolar, donde adquieren protagonismo y pueden llegar a ser más potentes que las propias respuestas.

Expositora Dra. Sandra Rojas

Explicación de la una actividad durante el taller

Participantes del Taller

Taller

Electroquímica a tu alcance: El vaivén de los electrones

Fecha
Martes 1 de octubre de 2024

Facilitador
Dr. Jorge Ibáñez Cornejo
Ingeniero Químico, Doctorado y postdoctorados en fisicoquímica
Profesor de la Universidad Iberoamericana de México
Premio Nacional de Química "Andrés Manuel del Río, Premio Regional ANUEIS a la Innovación en la Práctica Docente
jorge.g.ibanez@gmail.com

Resumen
Se realizan actividades prácticas en el campo de la electroquímica, con materiales de fácil acceso, que se pueden llevar a cabo sin necesidad de contar con un laboratorio tradicional en los colegios de enseñanza media y superior. Se muestran las ventajas y posibilidades de la Química en Microescala y el significado del intercambio de electrones entre diferentes sustancias en el medio ambiente, entre ellas el ozono.

Expositor Dr. Jorge Ibáñez Cornejo.

Dr. Jorge Ibáñez explicando los experimentos.

Participantes durante la ejecución de los experimentos.

Taller

La Química del Whisky

Fecha
Viernes 4 de octubre de 2024

Facilitador
Lcdo. Víctor Adorno Badillo
Programa Graduado en Educación,
Caribbean University, Bayamón
Expresidente del Colegio de Químicos de Puerto Rico
vadorno@caribbean.edu

Resumen
Durante el taller se explicó el principio del Whisky, los ingredientes que se utilizan en su elaboración, cómo influye la química en cada uno de los procesos de elaboración, instrumentación y metodología utilizada para los análisis. Además, se realizó la degustación de cuatro Whiskys distintos, en los que se les explicó a los participantes como se tomaban y se les cuestionó acerca de los sabores que sentían cuando lo olían y tomaban. Se explicó que cada Whisky tiene un origen y sabor característico, depende de la persona el sabor que más le guste.

Expositor Licdo. Víctor Adorno Badillo

Durante la preparación de los vasos para la degustación

Participantes del taller en el salón principal

36° CLAQ 2024
PANAMÁ

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Visitas Técnicas

Visita Técnica

Parque Natural Metropolitano

El Colegio Panameño de Químicos junto al Instituto de Investigaciones Científicas y Servicios de Alta Tecnología de Panamá (INDICASAT) organizaron una visita al Parque Metropolitano en compañía del investigador, Dr. Alejandro De Sedas. La excursión se realizó el miércoles 2 de octubre en horas de la mañana, los participantes del CLAQ que se inscribieron exploraron los senderos, se les explicó sobre los distintos árboles y plantas con que cuenta el parque y su uso para las investigaciones que realizan en el instituto. Dentro del recorrido los participantes lograron llegar hasta el mirador Cerro Cedro donde se puede apreciar parte de los edificios de la ciudad de Panamá, el Cerro Ancón, entrada pacífica del Canal de Panamá y las afueras de la ciudad.

Enlaces de interés: https://parquemetropolitano.org/ y https://indicasat.org.pa/

Participantes saliendo a la excursión desde el hotel Sortis

Vista de la ciudad desde el mirador Cerro Cedro

CLAQ 2024
PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Visita Técnica

Planta de tratamiento de aguas residuales de Juan Díaz

La segunda visita se realizó el jueves 3 de octubre al Programa de Saneamiento de Panamá, específicamente a la Planta de Tratamiento de Aguas Residuales de Juan Díaz. Este programa busca recuperar las condiciones sanitarias y ambientales del área metropolitana y la eliminación de contaminación por aguas residuales no tratadas en los ríos urbanos y en las zonas costeras de la Bahía de Panamá. Se realizó un recorrido por el Centro Interactivo de Educación Ambiental donde se presentó un video que contiene toda la información del programa, se pudo ingresar a la sala de exhibición donde se encuentra una maqueta de la PTAR junto con una exposición de trabajos artísticos realizados por estudiantes de colegios del país. Se recorrió parte del edificio principal de la planta donde se encuentra el laboratorio. La química Belkis Gálvez expuso todo el trabajo que se realiza en el laboratorio como parte del control de calidad para verificar que las operaciones de la PTAR cumplen con las normas ambientales de descarga.
Enlace de interés: https://www.saneamientodepanama.gob.pa/

Participantes en la entrada del Centro Interactivo de Educación Ambiental

Participantes en la azotea del edificio principal y al fondo los clarificadores de la PTAR.

36º CLAQ
2024
PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Premios Mujeres Latinoamericanas en Química 2024

Premios Mujeres Latinoamericanas en Química 2024

La Federación Latinoamericana de Asociaciones Química (FLAQ) y la American Chemical Society (ACS), se han unido para entregar los Premios Mujeres Latinoamericanas en Química. La primera entrega de los premios fue durante el CLAQ de Colombia 2021 y la segunda edición fue en el CLAQ de Brasil 2022. El miércoles 2 de octubre durante el CLAQ 204 en Panamá se realizó la tercera edición. Las categorías que se entregan son: líder en la industria, líder emergente en química y ciencias relacionados y el último líder académica, con esto se desea establecer una equidad entre las distintas funciones que ejercen las mujeres dentro del campo de la química. Las ganadoras son seleccionadas a partir de las postulaciones recibidas y por un comité, considerando los méritos obtenidos y su contribución a la química. Los premios son patrocinados por CAS y ACS Publications.

Las ganadoras de este año son:

Líder emergente en química: Grissel Trujillo de Santiago
Este premio honró los logros de una joven destacada que sea científica o empresaria en el campo de la química. Trujillo es profesora investigadora del Tecnológico de Monterrey y directora científica de Forma Foods. Ella inventó, desarrolló y aplicó la bioimpresión caótica, que es un método para formar capas y materiales porosos a escala. Esta tecnología es el núcleo del negocio de Forma Foods, una empresa de productos cárnicos de nueva generación que ella cofundó en 2022.

Dra. Grissel Trujillo de Santiago recibiendo el premio por parte del
Dr. Jorge Messeder (FLAQ)

Liderazgo en la industria: Priscila Castelani

Este premio reconoce a las mujeres de las industrias química, farmacéutica o biotecnológica por sus innovaciones y contribuciones al éxito comercial y el impacto social. A lo largo de su carrera en Indorama Ventures, Castelani ha desarrollado productos innovadores de gran eficacia agronómica y toxicidad reducida para los agricultores y el medioambiente. Su liderazgo ha dado lugar al centro de investigación y desarrollo biotecnológico de Indorama, así como a la primera línea de productos de la empresa a partir de un bioproceso.

Dra. Priscila Castelani agradeciendo por el premio

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Liderazgo en el ámbito académico: Coralia Osorio Roa

Este premio honró a una mujer con un historial excepcional en educación, investigación avanzada en química y un fuerte compromiso con la igualdad de género en la ciencia. Osorio es editora adjunta de ACS Food Science & Technology y ha dedicado su carrera al avance de los campos de la ciencia y la tecnología de los alimentos, la química de productos naturales y la ecología química. Es profesora del Departamento de Química de la Universidad Nacional de Colombia, en Bogotá, y, hasta la fecha, ha asesorado a 66 estudiantes de pregrado, maestría y doctorado.

MSc. Víctor Acevedo entregando el premio a la Dra. Coralia Osorio Roa

Fuente: ACS Newsroom, https://axial.acs.org/publishing/premios-mujeres-latinoamericanas-en-quimica-2024

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Premios Pósters

Premio Internacional

Sergio Daniel Rodríguez Parra, Colombia, Universidad Nacioal de Colombia. Estudio de los compuestos activos en el aroma de la pitanga (Eugenia uniflora L.).
srodriguezpa@unal.edu.co

Premio Nacional

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Juan Fernandez, Panamá, INDICASAT. Comparación de la Diversidad Metabólica de las Hojas de Dos Variedades de Coffea arabica cultivadas en Panamá juanor_fer11@hotmail.com

RGH

Tu proveedor de confiaza en tu laboratorio

Distrbuidor autorizado de:

SIGMA-ALDRICH®

MERCK

sotax

BRAND

Milli-Q®
Lab Water Solutions

Supelco®

36° CLAQ
PANAMÁ
2024
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Conferencias Magistrales

36° CLAQ PANAMÁ 2024

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Efectos de Múltiples Estresores Agrícolas sobre el Funcionamiento de Ecosistemas Fluviales Tropicales: Hallazgos recientes y Aplicaciones Ecotoxicológicas desde el Lab-ECOTOX.

Dra. Aydee Cornejo

Instituto Conmemorativo Gorgas
Panamá

acornejo@gorgas.gob.pa

36° CLAQ PANAMÁ 2024

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Química de Materiales y Nanotecnologías.

Dra. Luisa Whittaker-Brooks

Universidad de Utah
Estados Unidos

Luisa.Whittaker@utah.edu

36° CLAQ 2024
PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Lenguajes Científicos y Lectura Comprensiva en Química: Relaciones Necesarias para la Equidad Social.

Dra. Sandra Rojas

Universidad Santiago de Chile – Chile

Sandra.Rojas.R@usach.cl

36° CLAQ PANAMÁ 2024

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Biopolímeros y sus Aplicaciones en la Industria Farmacéutica.

Dr. Ricardo Riguera

Universidad Santiago de Compostela
Santiago de Compostela, España

Ricardo.Riguera@usc.es

36° CLAQ PANAMÁ 2024

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Aprendizaje a Distancia: Un Enfoque Experimental

Dr. Jorge Ibañez

Universidad Iberoamericana de México, México

Jorge.Ibanez@uia.mx

36° CLAQ PANAMÁ 2024

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

El Cabello y su Aplicación en Forensic.

Dr. Jean Claude Álvarez

Hospital Universitario de Paris Saclay
Francia

Jean-Claude.Alvarez@aphp.fr

36° CLAQ 2024
PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Terapia Fotoquímica: De la Ciencia Básica a la Aplicada como Alternativa para el Tratamiento del Cáncer.

Dr. José Luis Robinson Duggon

Universidad de Panamá- Panamá

Jose.Robinson@up.ac.pa

36° CLAQ PANAMÁ 2024

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Cinética de Evaporación de Mezclas Líquidas y su Manejo Seguro.

Dr. Julio Mata Segreda

Universidad de Costa Rica, Costa Rica

Julio.Mata@ucr.ac.cr

Cinética de evaporación de mezclas líquidas y su manejo seguro
Evaporation kinetics of liquid mixtures and safe handling

Julio F. Mata-Segreda
Laboratorio de Biomasas, Escuela de Química, Universidad de Costa Rica, 11501-2060, Costa Rica.

julio.mata@ucr.ac.cr

Palabras clave: riesgo de incendio, temperatura de ignición, evaporación de mezclas líquidas.
Keywords: fire risk, flash point, evaporation of liquid mixtures.

Evaporation kinetics is an uncomplicated way to study molecular interactions in the liquid phase, as well as a procedure to assess volatility matters concerning fire risk and occupational health and safety.

Pure liquids evaporate following the kinetic scheme of the Hertz-Knudsen "traditional equation":

$$-dnliq/dtArea = \kappa pv(T)2\pi MRT$$

where $p_v(T)$ is vapour pressure at temperature T, M is the substance molecular mass and RT has the usual meaning. κ stands for the evaporation coefficient that gives the probability of surface-located molecules to transfer to the gas phase. Liquid mixtures show a different kinetic behaviour: an initial constant-rate period, followed by a variable-decreasing rate regime, described by the rate law:

$$-dm/dtArea = k\ (m - mfinal)$$

where m is the remaining liquid mass at time t.

The molecular interpretation of the constant-rate phase considers the liquid-gas interface initially constituted by the more volatile components. This situation occurs for as long as the rate of evaporation of the more volatile components equals to the rate of arrival of identical molecules at the interface. Thus, the vapour pressure remains almost constant and likewise does the overall evaporation rate, until a certain critical degree of evaporation, where a dynamic imbalance appears making mass transfer of the less volatile species arrival to the interface as the rate-determining factor. Now, the evaporation rate is

proportional to the remaining number of species able to evaporate at the temperature of observation.

Fire risk and relative volatility of different liquids in closed working spaces can be compared by this proposed laboratory procedure,[1] by analysing the mass-time profiles obtained by means of the use of unexpensive drying balances. The multicomponent liquid materials discussed in this presentation are common commercial products: fuels, industrial solvents, and flammable household products. The two-phase kinetic description was clearly observed, and the corresponding mechanistic interpretation depends on the molecular properties of the components. A correlation is discussed between the initial evaporation rate and flash point. Cases are discussed in the context of fire risk and occupational health/safety context.

Reference

1. Aragón, H.; Mata-Segreda, J. F. (2023). Evaporation kinetics of liquid mixtures and safe handling. *ACS Chem. Health Saf. 30*, 54-62.

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

36° CLAQ PANAMÁ 2024

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Compuestos con Potencial Biomédico y Agrícola a Partir de Microorganismos Simbióticos de Panamá.

Dr. Marcelino Gutierrez

INDICASAT-PANAMÁ

mgutierrez@indicasat.org.pa

Compuestos con Potencial Biomédico y Agrícola a Partir de Microorganismos Simbióticos de Panamá
Compounds with Biomedical and Agricultural Potential from Symbiotic Microorganisms from Panama

Gutiérrez, M.[1], Boya, C.[1], Rodriguez C.[1], Mojica, R.[1], Cantilo, V.[1], Rodríguez, G.[1], Urrutia, J.C.[1]

[1] Centro de Biodiversidad y Descubrimiento de Drogas, Instituto de Investigaciones Científicas y Servicios de Alta Tecnología (INDICASAT AIP), Panamá, Panamá.

mgutierrez@indicasat.org.pa

Palabras clave: Bioprospección, microorganismos simbióticos, endófitos, antiparasitarios

Panamá es una de las zonas megadiversas del mundo y con un alto nivel de endemismo. Esta diversidad biológica está acompañada de una riqueza química que posee actividades biológicas en diferentes áreas terapéuticas, así como en aplicaciones agrícolas. En los últimos años se ha observado que muchas de estas sustancias bioactivas, inicialmente aisladas de organismos como plantas, corales, tunicados, etc., en realidad son producidas por microorganismos simbióticos.

Existen varios ejemplos de drogas aprobadas por la FDA en el tratamiento del cáncer como el Yondelis®, inicialmente aislado de un tunicado y el Taxol®, aislado de una planta, en donde se demostró que el verdadero origen biosintético de estas moléculas es microbiano. Dada esta tendencia, y aprovechando la rica diversidad biológica que posee nuestro país, en nuestro programa de descubrimiento de drogas en INDICASAT AIP decidimos estudiar varios sistemas simbióticos disponibles en Panamá.

Los microorganismos son colectados en diferentes localidades de la geografía nacional, son extraídos con solventes orgánicos y los extractos son evaluados en ensayos biológicos agrícolas, antiparasitarios, antimicrobianos y anticancerígenos, entre otros. Los extractos activos son sometidos a aislamiento biodirigido utilizando diferentes técnicas cromatográficas y los principios activos son identificados mediante técnicas espectroscópicas, principalmente resonancia magnética nuclear y espectrometría de masas.

Como resultado se han encontrado una serie de metabolitos especializados que poseen actividad biológica como antimicrobianos y antiparasitarios, así como en ensayos agrícolas que han sido publicados en revistas científicas.

Estas moléculas producidas por estos microrganismos cumplen diferentes roles ecológicos, en muchos casos actuando como sustancias que defienden a sus hospederos del ataque de patógenos. Mas allá de su rol ecológico, estos compuestos poseen amplio rango de actividades biológicas que buscamos aprovechar en nuestro programa.

Nuestros resultados han demostrado que la diversidad microbiana de Panamá, y en especial los microorganismos simbióticos, son una fuente importante de moléculas con diversas aplicaciones biotecnológicas de importancia para el ser humano.

Referencias

1. Rodriguez, C., Barrios-Jaén, M., Mejía, L. C., & Gutiérrez, M. (2024). Antifungal activity of menisporopsin A against relevant plant pathogens. Journal of Fungi, 10(6), 381.
2. Torres-Mendoza, D., Coronado, L., Pineda, L., Guzmán, H., Dorrestein, P., Spadafora, C., & Gutiérrez, M. (2018). Pumilacidins from the Octocoral-Associated Bacillus sp. DT001 Display Anti-Proliferative Effects in *Plasmodium falciparum*. Molecules, 23(9), 2179.

36° CLAQ PANAMÁ 2024

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Inteligencia Artificial

Dra. Aura López

Centro de Investigación Educativa
Panamá

Alopez.usb@gmail.com

36° CLAQ 2024
PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Matemática en la Enseñanza de la Química

Dra. Jeanette Shakalli

Fundapromat, Panamá

jshakall@gmail.com

36° CLAQ 2024 PANAMÁ

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

La Fuerza del Enlace Químico

Dr. Jesús Hernández Trujillo

Universidad Nacional Autónoma de México
México

Jesusht@unam.mx

La Fuerza del Enlace Químico

Jesús Hernández Trujillo Facultad de Química, UNAM,

Aunque es común en el lenguaje químico referirse a la intensidad de las interacciones intra e intermoleculares en términos de fuerzas, la naturaleza de éstas usualmente se analiza en términos energéticos y con modelos orbitales. En este trabajo, de naturaleza teórica, se estudia el campo vectorial de la fuerza ejercida sobre la distribución electrónica de átomos y moléculas, la llamada fuerza de Ehrenfest (FE). Primeramente, se presenta una breve introducción a la topología química cuántica, campo de estudio que engloba campos escalares y vectoriales de relevancia química al cual pertenece la FE. Posteriormente, se hace un recuento de la información que contiene este campo vectorial con énfasis en los resultados más recientes obtenidos por nuestro grupo de investigación. Por ejemplo, dado que la FE es consistente con el principio de exclusión de Pauli, permite recuperar la estructura de capas de átomos y moléculas, definir estructura molecular y caracterizar las interacciones como covalentes, polares o iónicas. Los resultados muestran que la FE es un descriptor cuya definición cuenta con un sólido soporte físico para la exploración de conceptos importantes sobre la naturaleza del enlace químico.

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

36° CLAQ PANAMÁ 2024

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Mesas Redondas

36° CLAQ PANAMÁ 2024

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Mesa Redonda: Química de los venenos de secreción y su importancia terapéutica.

Doctora Hildaura Patiño
Universidad de Panamá

Doctor Gerardo Corzo
Universidad Nacional
Autónoma de México

Doctor Marcos Salazar
Universidad de Panamá

Moderador

Licenciado Felipe Barría
Universidad de Panamá

1 de Octubre 2024
14:50 - 15:50

36° CLAQ PANAMÁ 2024

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Mesa Redonda: Materiales y sus aplicaciones industriales.

Doctor Ricardo Riguera

Universidad de Santiago de Compostela, España

Doctora Lusia Whittaker-Brooks

Universidad de Utah

Moderador

Doctor Julio Mata Segreda

Universidad de Costa Rica

2 de Octubre 2024
14:50 - 15:50

36° CLAQ 2024
PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Mesa Redonda: Instituciones que rigen la profesión de químico en Latam-FLAQ

Brenda Checa
Presidente Colegio Panameño de Quimicos

Maria Santiago Reyes
Presidente Colegio de Químicos, Puerto Rico

José de Ribamar Oliveira Filho
Presidente do Conselho Federal De Química

Moderador

Doctor Rafael Vásquez
Florida State University

3 de Octubre 2024
14:50 - 15:50

36° CLAQ PANAMÁ 2024

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Mesa Redonda: Explorando Nuevos Horizontes: Ciencia, Curiosidad y el Futuro en tus Manos

Doctor Ricardo Riguera

Universidad de Santiago de Compostela, España

Doctora Sandra Rojas

Universidad de Santiago de Chile.

Doctor Gerardo Corzo

Universidad Nacional Autónoma de México

Moderadora

Magister Irene Castillero

FCNET - Universidad de Panamá

4 de Octubre 2024
14:50 - 15:50

Todo para tu laboratorio

Soluciones científicas a tu medida

TPLab NORLAB PHYWE eisco CAROLINA

¡Equipamos, diseñamos y apoyamos la ciencia!

TPLab Inc. y Norlab ofrecen soluciones integrales para laboratorios, incluyendo equipamiento completo, diseño y fabricación de mobiliario certificado, y una línea educativa especializada. Nuestra misión es transformar los espacios de trabajo en centros de excelencia científica y apoyar la educación a todos los niveles.

Contacto:

info@tplabinc.com

www.tplabinc.com

+507 284-3126

+507 6965-3333

SCAN ME

Nuestros Servicios

Fisica Quimica Biologia Ciencia

- **Equipamiento Completo**
  Todo lo necesario para tu laboratorio.
- **Mobiliario Certificado**
  Diseño y fabricación de laboratorios personalizados con Norlab.
- **Línea Educativa**
  Equipamiento para escuelas y universidades.

SEFA NORMAS ISO

36° CLAQ
PANAMÁ
2024
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Exposiciones Orales

TABLA DE CONTENIDO

Desarrollo De Sensores Impresos y Biosensores Electroquímicos Basados en Composites Epoxi-grafitos Conductores..... 2

Development Of Printed Sensors and Electrochemical Biosensors Based on Conductive Epoxy-graphite Composites Conductive Epoxy-graphite Composites. . 2

Biorrefinería Hidrotermal Para La Obtención De Productos Químicos Plataforma, a Partir de Residuos Agroindustriales de Café: Escala Laboratorio. 3

Hydrothermal Biorefinery For Obtaining Platform Chemicals From agro-industrial Coffee Waste: Laboratory Scale. 3

Predicción del Rendimiento en Reacciones Catalíticas de Borilación Mediante Machine Learning 4

Yield Prediction in Catalytic Borylation Reactions Using Machine Learning..... 4

Explorando el Método Singapur en La Enseñanza De La Bioquímica: Un Análisis Integral..... 5

Exploring The Singapore Method in Biochemistry Teaching: A Comprehensive Analisis..... 5

Evaluación Del Efecto Del Tiempo y El Control De Temperatura Sobre La Composición y La Actividad Antioxidante De Ganoderma lucidum Obtenido Por Fermentación en Estado Líquido 7

Evaluation Of The Effect Of Time and Temperature Control On The Composition an Antioxidante Activity Of *Ganoderma lucidum* Culture Obtained By Fermentation in a Liquid State..... 7

Películas de Alginato Cargadas con Tween 80 Para La Desorción de Petróleo Impregnado en Piedras Desorption Of Impregnated Oil in Rocks Using Alginate Films Loaded with Saqta Root Saponins Applied by Spray Technique 8

Síntesis de Nuevos Híbridos Moleculares 4-(4-hidroxi-3-metoxifenil) tetrahidroquinolina/1,2,3-triazol, Compuestos Con Potencial Actividad Anticancerígena 10

Synthesis Of Novel Molecular Hybrids of 4-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl) Fetrahydroquinoline/1,2,3-Triazole, Compounds With Potential Anticancer Activity 10

Evaluación De La actividad Anti-inflamatoria y Antibacterial De La Enzima Serratiopeptidasa Aislada De La Bacteria Serratia marcescens C8 11

Evaluation Of The Anti-inflammatory and Antibacterial Activity Of The Enzyme Serratiopeptidase Solated From The Bacterium *Serratia marcescens* C8 11

Desafíos y oportunidades analíticas en el estudio de los dsiruptores endocrinos en la evaluación del exposoma..... 12

Analytical Challenges and Opportunities in the Study of Endocrine Disruptors in Exposome Assessment..... 12

Correlación de Espectros de MS/MS con Mecanismos de Fragmentación para la Identificación de Metabolitos Secundarios: Un Enfoque Basado en la Estructura Molecular 14

Venenos de Escorpión en Panamá: conocimientos actuales y perspectivas científicas 15

ANÁLISIS DEL IMPACTO DEL CÓCTEL DE BACTERIÓFAGOS EN EL CULTIVO DE LA MICROALGA Desmodesmus communis. 16

ANALYSIS OF THE IMPACT OF THE BACTERIOPHAGE COCKTAIL IN THE CULTURE OF *Desmodesmus communis.* 16

Uso De La Fluorescencia Tridimensional y los EEMs Para La Caracterización De La Composición Espectroscópica Del Agua 17

Estudio Del Potencial Fertilizante De Un Compuesto Orgánico Mineral, Y Su Aplicación Piloto En Cultivo De Frijol 18

Study Of The Fertilizing Potential Of an Organic Mineral Compound, and Its Pilot Application in Bean Crops..... 18

Identificación de Plaguicidas por Cromatografía Gaseosa y Cromatografía Líquida de Alta Resolución Acopladas a Espectrometría De Masas en El Fruto De Piñas Recolectadas en La Ciudad De Santiago de Cali..... 19

Identification Of Pesticides By Gas Chromatography and High-Performance Liquid Chromatography Coupled To Mas Spectrometry in Pineapple Fruit Collected in The City Of Santiago De Cali. 19

Quenching Del Oxígeno Singulete Por Antioxidantes Naturales y Sintéticos: Estudio Cinético 21

Quenching Of Singlet Oxygen By Natural and Synthetic Antioxidants: Kinetic Study 21

Talleres De Bioquímica 22

Biochemistry Workshops..... 22

Defensas Antioxidantes Endógenas En Jóvenes Adultos De La República De Panamá..... 23

Endogenous Antioxidant Defenses in Young Adults Of The Republic Of Panama ... 23

Evidencia De Los Efectos Del Medioambiente Sobre La Durabilidad Del Concreto en Panamá 24

Evidence of Environmental Effects on Concrete Durability in Panama..... 24

Síntesis de Nuevos Dipeptoides Con Actividad Contra La Enzima M1 Alanilaminopeptidasa 25

Synthesis Of Novel Dipeptoids With Activity Against The Enzyme M1 Alanylaminopeptidase 25

Análisis Cinético De La Concentración De Etanol en Geles de Interés Sanitario 26

Kinetic Analysis Of The Concentration Of Ethanol in Gels Of Health Interest 26

Evaluación De Un Extracto Vegetal Del Género Zanthoxylum Con Actividad Agonista LXR Como Potencial Agente Protector De La Mielina En El Modelo De Desmielinización Por Cuprizona..... 27

Assessment Of a Plant Extract From The Zanthoxylum Genus With LXR Agonist Activity as a Potential Myelin Protective Agent in The Cuprizone Demyelination Model. 27

Péptidos Antitumorales Helicoidales Inducen La Apoptosis Especifica De Las Líneas Células Tumorales A549 y SK-MEL-23 Afectando La Transcripción De Genes Que Median La Apoptosis y Supervivencia..... 28

Helical Antitumor Peptides Induce Specific Apoptosis Of Tumor Cell lines A549 and SK-MEL-23 Affecting The Transcription Of Genes Mediating Apoptosis and Survival 28

Estudio De La reacción De Ciclocondensación Oxidativa De 2-formilquinolin-3-carboxilatos con 2'-aminobenzamidas Para La Síntesis De Nuevos Híbridos Moleculares De Tipo estirilquinolina-quinazolinona. 29

Study Of The Oxidative Cyclocondensation Reaction Of 2-formylquinoline-3-carboxylates with 2'-aminobenzamides To Synthesize Novel styrylquinoline-quinazolinone Molecular Hybrids..... 29

Las 2-aril-4-metilquinazolinas Como Precursores Valiosos En El Desarrollo De Nuevos Híbridos Moleculares quinazolina-quinazolin-4-ona. Síntesis, Caracterización y Predicción De Sus Propiedades Farmacocinéticas 30

2-aryl-4-methylquinazolines as Valuable Precursors in The Development Of Novel Molecular Hybrids quinazolina-quinazolin-4-ones. Synthesis, Characterization, and Prediction Of Their pharmaco-kinetic properties 30

Desafíos y oportunidades analíticas en el estudio de los dsiruptores endocrinos en la evaluación del exposoma..... 31

Analytical Challenges and Opportunities in the Study of Endocrine Disruptors in Exposome Assessment..... 31

Análisis Del Efecto Del Campo Magnético Sobre El Flujo De Agua a Través De acuaporinas TIP3;1 Mediante Dinámica Molecular en GROMACS..... 33

Analysis Of The Effect Of The Magnetic Field on Water Flow Through TIP3;1 Aquaporins using Molecular Dynamics in GROMACS 33

Interacciones Interfaciales Entre Nanocelulosa Bacteriana y Polihidroxibutirato: Dinámica Molecular De Sistemas Biopoliméricos Compuestos Para Aplicaciones Sostenibles 34

Bacterial Nanocellulose and Polyhydroxybutyrate Interfacial Interactions: Molecular Dynamics of Composite Biopolymeric Systems for Sustainable Applications..... 34

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Cinética De Inactivación De Polifenoloxidasa en Frutos Rubus glaucus, Tratados Con Ácido Ascórbico y Cloruro De Calcio *35*

Kinetics Of Polyphenoloxidase Inactivation in *Rubus glaucus* Fruits, Treated With Ascorbic Acid and Calcium Chloride 35

Adsorción De Sulfato en Sistemas Mg-Al/Carbón Activado *36*

Sulfate Adsorption in Mg-Al/Activated Carbon Systems..... 36

Análisis De Superficies De Respuesta De La Depolimerización De PET Con Catalizadores De Ni-Zn-Al *37*

Use Of The Response Surface Methodology For PET Depolymerization With Ni-Zn-Al Catalysts 37

Exploración Del Espacio Químico De Actinobacterias Provenientes De Piscinas De Petróleo De La Amazonía Ecuatoriana *38*

Exploration Of The Chemical Space Of Actinobacteria Isolated From Oil Ponds in The Ecuadorian Amazon 38

Estudio Computacional De La Viscosidad De Una Disolución Acuosa De Fructosa Utilizando El Modelo SPC/E Mediante Dinámica Molecular Con GROMACS *39*

Computational Study Of The Viscosity Of an Aqueous Fructose Solution Using The SPC/E Model by Molecular Dynamics With GROMACS 39

Captura Reversible De Fósforo Empleando Arcillas Funcionalizadas *40*

Reversible Capture Of Phosphorus Using Functionalized Clays 40

Metaabolic Profiling-Assisted Identification Of Antifungal Azadirone-Type Limonoids From *Azadirachta indica* Leaves 41

Identificación Asistida por Perfilado Metabólico de Limonoides Antifúngicos Tipo Azadirona De Hojas De Azadirachta indica..... *41*

Implementación Del Modelo Tpack Para La Enseñanza De La Química A Nivel De Educación Media y Su Influencia En El Rendimiento Académico *42*

Implementation Of The Tpack Model For The Teaching Of Chemistry At The Middle Education Level and Its Influence on Academic Performance..... 42

Propiedades fotocatalíticas mejoradas de sistemas acoplados AgBr/SnO2 bajo luz UV y visible *43*

Enhanced UV and visible light photocatalytic properties of synthesized AgBr/SnO_2 composites..... 43

Síntesis one-pot Tipo Dominó De (E)-2-aril-4-estirilquinazolinas A Partir De La 2'-aminoacetofenona *44*

One-pot Domino Type Synthesis Of (*E*)-2-aryl-4-styrylquinazoline From 2'-aminoacetophenone 44

Electroquímica De Óxidos De Hierro Tipo Ferritas y Perovskitas Para Aplicaciones Tecnológicas..... *46*

Electrochemistry Of Iron Oxides: Ferrites and Perovskites For Technological Applications..... 46

Análisis Quimiométrico De Mieles Colombianas Mediante Conductividad Eléctrica, Color, Actividad De Agua, Densidad Optica Cenizas y Poder Rotatorio..... 48

Chemometric Analisys Of Colombian Honeys Using Electrical Conductivity Color Water Activity Ash Optical Density and Rotatory Power 48

Respuesta Molecular Del Clavel (Dianthus Caryophyllus L.) Asociada A La Inducción De Resistencia Sistémica Adquirida Tras La Aplicación Foliar De Tiamina Durante El Marchitamiento Vascular Causado Por Fusarium Oxysporum F. Sp. Dianthi. 49

Molecular Response Of Carnation (*Dianthus Caryophyllus* L.) Associated With The Induction Of Acquired Systemic Resistance After The Foliar Application Of Thiamine During Vascular Wilting Caused By *Fusarium Oxysporum* F. Sp. D*ianthi.* 49

Efecto De La Concentración De Un Espumante y Eticulante Férrico en La Estructura De Un Criogel De Pectina Diseñado Como Matriz Alimentaria 50

Effect Of The Concentration Of a Foaming Agent and Ferric Cross-Linker on The Structure Of a Pectin Cryogel Designed As a Food Matrix..... 50

Síntesis De Ésteres Biliares De Cadena Corta. Explorando Su Potencial Como Agentes Gelificantes..... 51

Short-chain Bile Acid Esters: Exploring Their Potential As Gelling Agents 51

Análisis Cinético De Peroxidasa y Polifenoloxidasa en Frutos Rubus glaucus y Su Influencia En El Aprendizaje Multidimensional De Cinética Enzimática ... 52

Kinetic Analysis Of Peroxidase and Polyphenoloxidase in *Rubus glaucus* Fruits and Their Influence on Multidimensional Learning Of Enzyme Kinetics..... 52

Análisis Cinético De CH_4 y Propiedades Fisicoquímicas De Bioles, Generados Por Biodigestión Anaeróbica De Excretas en Biodigestores De Membrana.... 53

Kinetic Analysis Of CH_4 and Physicochemical Properties Of Biols, Generated By Anaerobic Biodigestion Of Excreta in Membrane Biodigesters 53

Estudios Estructurales y Biosintéticos De La Melleína y La Hidroximelleína, Metabolitos Secretados Por El Hongo Fitopatógeno Macrophomina phaseolina 54

Structural and Biosynthetic Studies Of Mellein and Hydroxymellein, Metabolites Secreted By The Phytopathogen Fungus *Macrophomina phaseolina* 54

Nanopartículas De PLGA De Diferente Peso Molecular (Mw): Preparación, Caracterización Fisicoquímica y Unión/internacionalización Por Células Del Sistema Fagocítico Mononuclear..... 55

PLGA Nanoparticles Of Different Molecular Weight (Mw): Preparation, Physicochemical Characterization, and Binding/Internalization By Cells Of The Mononuclear Phagocytic System 55

Estudio De Adsorción Monocomponente De Cadmio y Cobre en Biocarbón de Theobroma cacao L. Obtenido Por Pirólisis Asistida Por Microondas..... 56

Study Of Adsorption Of Single-component Cadmium and Copper in Biochar From *Theobroma cacao* L. Obtained By Microwave-assisted Pyrolysis 56

Clases-Paseo: Posibilidades De Discusión Socio Científica En La Enseñanza De La Química 57

Class walks: Possibilities Of Socio-Scientific Discussion in The Teaching Of Chemistry 57

Un Quimiosensor Fluorescente a Base De Quinolina Para Detectar Iones Cianuro 59

A Quinoline-Based Fluorescent Chemosensor For Detect Cyanide Ions 59

Caracterización Fitoquímica Del Extracto Etanólico De piper hispidum y Evaluación in vitro De La Actividad Antimicobacteriana Frente a Bacterias Del Género mycobacterium. 60

Phytochemical Characterization Of The Ethanol Extract Of *piper hispidum* and *in itro* Evaluation Of Antimycobacterial Activity Against Bacteria Of The Genus *mycobacterium* 60

Análisis de la Actividad Antioxidante de la Verbesina parviflora 61

Analysis of Antioxidant Activity in *Verbesina parviflora* 61

Desarrollo y Caracterización De Polímeros Superabsorbentes Biodegradables Para Una Mayor Retención De Agua y Una Reducción en La Irrigación en La Agricultura. 62

Development and Characterization Of Biodegradable Superabsorbent Polymers For Greater Water Retention and Reduced Irrigation in Agriculture 62

Caracterización De Metales en Relaves Provenientes De Minería Artesanal De Oro Por Espectroscopia De Absorción Atómica en El Municipio De Suárez Cauca Colombia 63

Characterization Of Metals in Tailings From Artisanal Gold Mining By Atomic Absorption Spectroscopy in The Municipality Of Suárez Cauca Colombia 63

Desenmarañando La Fotoquímica Del Azul De Toluidina Para El Desarrollo De Aplicaciones en Terapia Fotodinámica 64

Unraveling The Photochemistry Of Toluidine Blue For The Development Of Photodynamic Therapy Applications 64

Evaluation Of The Residuality Of Persistent Organic Pollutants and Metals in Tropical Fruits From La Unión, Antioquia, Colombia 66

Evaluación De La Residualidad De Contaminantes Orgánicos Persistentes y Metales en Frutas Tropicales De La Unión, Antioquía, Colombia 66

Caracterización Fisicoquímica y Modelamiento Cinético De un Combustible Verde en Una Llama De Flujo Opuesto 67

Physicochemical characterization, and kinetic modeling of a green fuel in an opposed flow flame 67

Diseño in silico De un Bio-receptor Altamente Selectivo Para El Reconocimiento De Cortisol 68

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

In silico Design Of a Highly Selective Bioreceptor For Cortisol Recognition 68

Uso De La Espectroscopia De Mössbauer en El Control De Calidad De Suplementos Terapéuticos Antianémicos Que Contienen Hierro 69

Use Of Mössbauer Spectroscopy in Quality Control Of Iron-containing Antianemic Therapeutic Supplements..... 69

Evaluación Del Efecto Citotóxico De LL-37 en Modelos De Membrana Eucariota Por Espectroscopia Infrarroja..... 70

Evaluation Of The Cytotoxic Effect of LL-37 on Eukaryotic Model Membranes By Infrared Spectroscopy 70

Síntesis Electroquímica De Óxidos De Níquel y Cobalto Soportados en Espumas De Níquel 71

Electrochemical Synthesis Of Nickel and Cobalt Oxides Supported on Nickel Foams..... 71

Síntesis De Oximas Derivadas De Alquilacilpirazolonas 72

Synthesis Of Oximes From Alkylacylpyrazolones 72

Conviviendo Con Moléculas..... 73

Living With Molecules..... 73

El Cómic en La Enseñanza De la Química: Una Propuesta Libertaria 75

The Comic in The Teaching Of Chemistry: a Libertarian Proposal 75

Sistemas Catalíticos Heterogéneos y Homogéneos Para La Conversión De Glucosa a 5- Hidroximetilfurfural..... 76

Heterogeneous and Homogeneous Catalytic Systems For The Conversion Of Glucose to 5- Hydroxymethylfurfural..... 76

Uso Del Lodo Residual De Una Depuradora Como Soporte De un Catalizador (Dióxido de Titanio) en Fotocatálisis Para La Remoción De Contaminantes Emergentes 77

Use Of Residual Sludge From a Wastewater Treatment Plant as a Support For a Catalyst (Titanium Dioxide) in Photocatalysis For The Removal Of Emerging Contaminants 77

Eficiencia Del Lodo De Una Planta Potabilizadora De Agua Como Adsorbente De un Colorante Textil en La Ciudad De Arequipa, Perú 78

Efficiency Of Sludge Rom a Water Treatment Plant as an Adsorbent For a Textile Dye in The City Of Arequipa, Peru..... 78

Porfirinatos De Metales De Transición Como Bits Cuánticos..... 79

Transition Metal Porphyrinates as Quantum Qubits..... 79

Proceso y Beneficios Del Reconocimiento ACS Para Programas Globales De Química a Nivel De Pregrado 80

Process and Benefits Of ACS Recognition For Global Undergraduate Chemistry Programs 80

Niveles De Trihalometanos y Ácidos Haloacéticos en Aguas De Piscinas y Su Asociación Con Parámetros De Calidad Del Agua *81*

Levels Of Trihalomethanes and Haloacetic Acids in Swimming Pool Water and Their Association With Water Quality Parameters 81

Valorización Termoquímica De Residuos Agroindustriales De Plátano *82*

Valorization Of Agro-Industrial Banana Waste By Hydrothermal Carbonization Process 82

Recubrimientos De Nanoapatitas Sobre Superficies De Titanio Precalcificadas Mediante Ruta Biomimética Acelerada *83*

Nanoapatite Coatings on Pre-calcified Titanium Surfaces By an Accelerated Biomimetic Route 83

Síntesis y Caracterización De Nuevos Colorantes Derivados Del Pireno Para Su Uso en DSSCs *84*

Synthesis and Characterization Of New Pyrene-derived Dyes For Use in DSSCs ... 84

Diseño y Síntesis Química De un Análogo De Los Inhibidores De La HMG-CoA Reductasa (estatinas) Mediante QSAR *85*

Design and Synthesis Of a Novel HMG-CoA Reductase Inhibitor Derivate Using QSAR 85

Desarrollo De Una Nanoemulsión Agua en Aceite Con Potencial Antioxidante y Fotoprotector a Base De Aminoácidos Tipo Micosporinas *86*

Development Of a Water-in-Ol Nanoemulsion With Antioxidant and Photoprotective Potential Based on Mycosporin-like Aminoacids 86

Estudio Biofísico Del Mecanismo De Acción Del Péptido NA-CATH-ATRA-1-ATRA- 1 en Modelos De Membrana Plasmática *87*

Biophysical Study Of The Mechanism Of Action Of the Peptide NA-CATH-ATRA-1-ATRA-1 in Plasmatic Model Membranes 87

Mejora Del Comportamiento Termico De Aceite De Oliva Virgen Extra Adicionado Con Extractos Vegetales Naturales *88*

Improvement Of The Thermal Behavior Of Extra Virgin Olive Oil Added With Natural Vegetable Extracts 88

Adsorción De Nitratos y Nitritos Utilizando Arcillas Organofilicas Como Adsorbentes *90*

Adsorption Of Nitrates and Nitrites Using Organophilic Clays as Adsorbents 90

Síntesis De Nanocatalizadores Soportados en Òxido De Grafeno Reducido y Su Aplicación en La Producción De Diésel Renovable *91*

Synthesis Of rGO-Supported Nanocatalysts and Their Application in Renewable Diesel Production 91

Evaluación Biológica De Extractos Orgánicos De Emilia fosbergii *92*

Biological Evaluation Of Organic Extracts Of *Emilia fosbergii* 92

Análisis De Acrilamida en Café Robusta Coffea canephora Mediante Técnicas De Separación 93

Analysis Of Acrylamide in Robusta Coffee *Coffea canephora* by Sparation Techniques 93

Implementación De Un Método De Extracción y Cuantificación De Penicilina G y Cloxacilina en Queso y Yogurt Por Medio De CLAR con Detección UV 94

Implementation Of a Method For Extraction and Quantification Of Penicillin G and Cloxacillin in Cheese and Yogurt By HPLC With UV Detection 94

Producción De Biomasa Y Evaluación De Crecimiento Celular De Microalgas Del Género Chlorella Y Scenedesmus Para Su Implementación En Ensayos Biostimulantes Ante Semillas De Referencia 95

Biomass Production And Evaluation Of Cell Growth Of Microalgae Of The Genus *Chlorella* And *Scenedesmus* For Implementation In Biostimulant Tests Against Reference Seeds 95

Análisis De La Variación Geográfica De Los Componentes en El Veneno Del Escorpión Centruroides bicolor 97

Analysis Of Geographic Variation Of Components in The Venom Of The Scorpion *Centruroides bicolor* 97

Desde El Saber Ancestral a La Constatación De La Bioactividad, Una Investigación en Dos Plantas Medicinales Nativas Del Ecuador 98

From Ancestral Knowledge To The Verification Of Bioactivity, an Investigation on Two Medicinal Plants Native To Ecuador 98

La Enseñanza De La Química Orgánica a Nivel Postsecundario Universitario Desde La Innovación Curricular: Una Reflexión Fenomenológica Desde La Òptica De Los Profesores Universitarios 99

The Teaching Of Organic Chemistry At The Post-secondary University Through Curricular Innovation: a Phenomenological Reflection From The Perspective Of University Professors 99

Optimización De Proceso Foto-Electro Fenton Solar Para La Degradación De Contaminantes De Preocupación Emergente y Desinfección De Efluentes De Plantas De Tratamiento De Aguas Residuales 100

Optimization Of Solar Photo-Electro Fenton Process For Degradation Of Contaminants Of Emerging Concern and Disinfection Of Wastewater Treatment Plant Effluents 100

Audible Transduction Of Infrared Spectra: Exploring The Sonic Synthesis Of Molecular Vibrations 101

Diseño De Péptidos Derivados De La Proteína ACE2 Capaces De Neutralizar Pseudovirus De SARS-Cov-2 Mediante Aglutinación 102

Design Of Peptides Derived From The ACE2 Protein Capable Of Neutralizing SARS-Cov-2 Pseudovirus Through Agglutination 102

Desarrollo y Síntesis De Un Análogo De Los Quimioterapéuticos Inhibidores De La Topoisomerasa I, Por Metodologías De Cribado Virtual Basadas en Cambios Bioisoestéricos y QSAR *103*

Development and Synthesis Of An Analogue Of Topoisomerase I Inhibitor Chemotherapeutics Through Virtual Screening Methodologies Based On Bioisosteric Changes and QSAR 103

Identificación De Compuestos Orgánicos Volátiles De Mora oleifera *104*

Identification Of Volatile Organic Compounds Of *Mora oleifera* 104

Estudio Químico Biodirigido De La Planta De Manglar Mora oleifera *105*

Bioguided Chemical Study Of The Mangrove Plant *Mora oleifera* 105

Diseño y Caracterización De Un Péptido Quimérico Con Potencial Actividad Antiproliferativa, Evaluado En Líneas Celulares De cáncer Que Expresan La integrina αvβ6..... *106*

Design and Characterization Of a Chimeric Peptide With Potential Antiproliferative Activity, Evaluated in Cancer Cell Lines Expressing The Integrin αvβ6. 106

Integración De Exfoliación y Propiedades De Inmunoafinidad en Nanotubos De Carbono De Paredes Múltiples Mediante Funcionalización No Covalente Con Inmunoglobulina G Humana...... *107*

Integrating Exfoliation and Immunoaffinity Properties in Multi-Walled Carbon Nanotubes By Non-covalent Functionalization With Human Immunoglobulin G .. 107

La Química En La Cocina: Una Estrategia Innovadora Para El Aprendizaje De La Química *108*

Chemistry in The Kitchen: An Innovative Educational Strategy For Learning Chemistry 108

Actividad Fotocatalítica De Películas De Zno Co-Dopadas Con Co Y Cu *110*

Photocatalytic Activity Of Zno Thin Films Codoped With Co And Cu 110

Diagnóstico Molecular De La Enfermedad De Wilson En Cuba *111*

Molecular Diagnosis Of Wilson's Disease In Cuba 111

Diseño De Un Péptido Catiónico Anfipático Que Presenta Actividad Antibacterial Especifica Contra E. coli O157:H7 y Klebsiella pneumoniae ... *112*

Design Of An Amphipathic Cationic Peptide Exhibiting Specific Antibacterial Activity Against *E. coli O157:H7* and *Klebsiella pneumoniae* 112

Desarrollo Analítico Para La Evaluación De La Dinámica De Residuos De Plaguicidas Durante La Cocción De Lentejas y Garbanzos *113*

Analytical Development For The Evaluation Of The Dynamics Of Pesticide Residues 113

Análisis Del Impacto Del Cóctel De Bacteriófagos En El Cultivo De La Microalga Desmodesmus communis...... *114*

Analysis Of The Impact Of The Bacteriophage Cocktail In The Culture Of *Desmodesmus communis.* 114

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

CÍA. DISTRIBUIDORA JEMA, S.A.

"Ofrecemos y Servimos sólo lo mejor"
www.cdjemasa.com

Los mejores productos para tu laboratorio

- Cristalería.
- Reactivos para Análisis
- Material Plástico
- Refractómetros.
- Equipos de Laboratorio.
- Medidores de PH, Oxígeno Disuelto.
- Balanzas de Precisión y Analíticas.
- Micropipetas.
- Purificadores de Agua.
- Medidores Digitales.

Distribuidor Autorizado:

WHIRL-PAK® Filtration Group

MACHEREY-NAGEL

Wasserlab
Sistemas de purificación de agua
Water Purification Systems

MICROLIT

Scharlab
THE LAB SOURCING GROUP

Escanea aquí:

Email: ventas2@cdjemasa.com

Visítanos:

Bethania, Villa Cáceres, C-76, C-116

Desarrollo De Sensores Impresos y Biosensores Electroquímicos Basados en Composites Epoxi-grafitos Conductores.

Development Of Printed Sensors and Electrochemical Biosensors Based on Conductive Epoxy-graphite Composites Conductive Epoxy-graphite Composites.

Balbin Tamayo, A.I. [1], Correa Fajardo, L. [1], Lazo Fraga A.R.[2], Esteva Guas, A.M.[1], Enamorado Horrutiner, Y.[1]

1- Facultad de Química, Universidad de la Habana, Cuba.

2- Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, Cuba.

ibrahimaries009@gmail.com

Área temática: Química Analítica

Palabras claves: epoxi-grafito, sensores electroquímicos, biosensores, electrodos impresos

La necesidad de análisis en diversas áreas ha motivado la construcción de dispositivos electroquímicos, cuyo manejo sea sencillo y permitan realizar determinaciones en matrices complejas.

Se desarrolló un composite conductor epoxi-grafito, cuyas propiedades electroquímicas fueron evaluadas por voltametría de onda cuadrada y espectroscopia de impedancia electroquímica en sistema redox $[Fe(CN)_6]^{3-/4-}$; y se utilizó para construir electrodos selectivos potenciométricos en forma serigrafiada y biosensores electroquímicos.

Los electrodos impresos epoxi-grafito fueron modificados con membrana sensora de matriz de PVC y mostraron una respuesta potenciométrica a los cambios de concentración de la especie NO_3^-, con valores de las pendientes obtenidas -69 +/- 5 mV/dec, límite inferior de respuesta lineal $(4 \pm 1) \cdot 10^{-5}$ mol/L y límite de detección práctico $(2.4 \pm 0.6) \cdot 10^{-5}$ mol/L. Los electrodos epoxi-grafito fueron modificados con oligonucleótidos específicos para la detección ADN proviral. Lo cual fue comprobado para el ADN cromosomal extraído de linfocitos de sangre total, en muestras clínicas por la disminución de la intensidad de la corriente de oxidación, al ocurrir la hibridación en la superficie del electrodo con un 95% de confianza y baja variabilidad en condiciones de precisión intermedia. Además, se comprobó la capacidad de detección electroquímica a nivel molecular de la hibridación para el ARN del Sar-COV-2 en muestras sintéticas. También se ensayó la detección de la interacción antígeno-anticuerpo del factor de crecimiento EGF empleado como biomarcador de cáncer.

El composite conductor epoxi-grafito desarrollado mostró buenas propiedades electroquímicas, y constituye una poderosa herramienta para el desarrollo de electrodos selectivos a iones y biosensores electroquímicos para ADN/ARN, con potencialidades de uso en el análisis de muestras ambientales y biológicas.

Biorrefinería Hidrotermal Para La Obtención De Productos Químicos Plataforma, a Partir de Residuos Agroindustriales de Café: Escala Laboratorio.

Hydrothermal Biorefinery For Obtaining Platform Chemicals From agro-industrial Coffee Waste: Laboratory Scale.

Lozano-Pérez, Alejandra Sophia.[1], **Guerrero-Fajardo, Carlos Alberto**[1]

[1]Grupo de Investigación de Aprovechamiento Energético de Recursos Naturales (APRENA), Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

aslozanop@unal.edu.co

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola

Palabras clave: Hidrotermal, Valorización, Residuos de café, Químicos plataforma.

Colombia es el principal productor mundial de café arábica lavado suave y produce 12,6 millones de sacos de café verde, pero al mismo tiempo se vierten en campo abierto 784 000 toneladas de biomasa residual, de las cuales sólo el 5% se valoriza o utiliza.

El objetivo de este proyecto fue evaluar la obtención de productos químicos plataforma a partir de dichos residuos de café. Para lograr esto, se realizó la caracterización de la biomasa implementando el análisis próximo, análisis último y análisis estructural. Se hizo la valorización hidrotermal en rangos de temperatura de 120-180 °C (LHW) y 180-260 °C (HTC) a una hora, cuantificando los productos químicos plataforma obtenidos por HPLC-IR, haciendo su seguimiento por pH, conductividad, y caracterizando la fracción sólida por seguimientos en espectroscopía IR y análisis elemental. Se obtuvieron procesos de hidrólisis a partir de 150 °C, producción de químicos plataforma a partir de 180 °C y degradación a partir de 240 °C.

De la misma manera se analizó y describió la cinética de la hidrólisis de las estructuras lignocelulósicas a azúcares a 180 °C (LHW) y 200 °C (HTC), se obtuvieron órdenes de reacción de 1 y 3 respectivamente, aspecto que fue corroborado por HPLC-MS.

Se evaluó la incidencia de catalizadores homogéneos ácidos y básicos en el proceso y la eficiencia y selectividad de estos, deduciendo una alta selectividad con CH_3COOH, una alta eficiencia con H_2SO_4, y el uso de catalizadores básicos para la obtención de ácido fórmico y biochar. Finalmente, se evaluó el rendimiento de azúcares, ácido fórmico, ácido levulínico, HMF y furfural para finalmente reportar las condiciones óptimas para la obtención de estos a partir de residuos de cerezas de café.

Predicción del Rendimiento en Reacciones Catalíticas de Borilación Mediante Machine Learning

Yield Prediction in Catalytic Borylation Reactions Using Machine Learning

Alfredo Pereira[1], Oleksandra Trofymchuk[2]

[1]Facultad de Ingeniería, Arquitectura y Diseño, Universidad San Sebastián, Bellavista 7, Santiago 8420524, Chile

[2]Departamento de Química Orgánica y Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santiago 8380494, Chile

alfredo.pereira@uss.cl

Área Temática: Química teórica y computacional

Palabras clave: Reacciones de Borilación, Predicción de rendimiento, Machine Learning

En una reacción química, una o más moléculas se convierten en nuevos compuestos con características diferentes. En particular, las reacciones catalíticas de borilación son un tipo de reacción química en la que se incorpora un átomo de boro a una molécula orgánica. Estas reacciones son clave en síntesis orgánica, ya que permiten formar nuevos enlaces carbono-boro, que son muy útiles en la construcción de moléculas más complejas. Actualmente, las reacciones de borilación son muy importantes en química medicinal, siendo reportadas en el diseño de agentes anticancerígenos, antibacteriales, antivirales, entre otros.

El rendimiento de una reacción catalítica es la cantidad de producto que se obtiene a partir de una cantidad determinada de reactivos, y depende de diferentes condiciones de reacción tales como el solvente y la temperatura. En este sentido, es importante predecir el rendimiento de una reacción para optimizar procesos, reducir tiempos y minimizar costos de las etapas experimentales.

El objetivo de este trabajo es desarrollar modelos de aprendizaje automático supervisado para predecir el rendimiento de reacciones de borilación. Usando modelos basados en Random Forest, se logró clasificar correctamente entre reacciones de alto y bajo rendimiento, alcanzando exactitudes sobre el 80% y áreas bajo la curva ROC mayores a 0,8. Además, se estudiaron modelos no supervisados basados en agrupamiento y análisis de componentes principales para visualizar los datos y entender el complejo espacio químico de las reacciones de borilación. Creemos que este estudio puede ser una alternativa viable para aprovechar las reacciones de borilación reportadas hasta la fecha y podría ser especialmente útil para aquellos laboratorios que no tienen la capacidad de realizar experimentación de alto rendimiento para optimizar sus reacciones catalíticas.

Referencias

Ros, A., Fernández, R., & Lassaletta, J. M. (2014). Functional group directed C–H borylation. Chemical Society Reviews, 43(10), 3229-3243.

Meuwly, M. (2021). Machine learning for chemical reactions. Chemical Reviews, 121(16), 10218-10239.

Explorando el Método Singapur en La Enseñanza De La Bioquímica: Un Análisis Integral

Exploring The Singapore Method in Biochemistry Teaching: A Comprehensive Analisis

Borda, A.[1], Molina, A.[1], Rodríguez, R.[1]

[1]Grupo de investigación Didáctica y sus Ciencias, Universidad Pedagógica Nacional, Departamento de química, Maestría en Docencia de la química, Colombia, Bogotá D.C.

adbordab@upn.edu.co

Área temática: Enseñanza de la química

Palabras clave: Aprendizaje, bioquímica, educación, enseñanza y método Singapur.

La enseñanza en ciencias, especialmente en el ámbito de la bioquímica, requiere una reevaluación, centrándose en la cognición y los procesos contextuales que facilitan un aprendizaje significativo en los estudiantes, ya que la bioquímica es una ciencia que presenta dificultades en su aplicabilidad y su abstracción de conceptos. Por ello, resulta esencial abandonar enfoques educativos basados en la memorización y la rutina, ya que estos no promueven una participación y significativa en el aprendizaje.

En este contexto, los principios del método Singapur, destacando su enfoque en la resolución de problemas, el uso de lo Concreto, Pictórico y Abstracto (CPA) y su currículo en espiral, surgen como una estrategia prometedora para abordar los contenidos en bioquímica en el entorno educativo. La aplicación exitosa de este método en la enseñanza de las matemáticas, según estudios de Tapia y Murillo (2020), respalda la viabilidad de su implementación en la didáctica de las ciencias. Este enfoque ha demostrado ser eficaz y prometedor tanto en entornos tradicionales como en la educación en línea, según la investigación de Perugachi Cachimuel (2023).

Para la realización de este estudio, se utilizaron materiales tales como libros de texto de bioquímica, recursos audiovisuales relevantes para la enseñanza de conceptos bioquímicos, así como materiales de apoyo para la implementación del Método Singapur en el aula, incluyendo actividades prácticas y ejemplos de resolución de problemas.

La metodología empleada en este estudio se basó en una revisión exhaustiva de la literatura relacionada con la aplicación del Método Singapur en la enseñanza de la bioquímica. Se recopilaron datos de estudios previos que investigaron la efectividad de este enfoque educativo en diversas disciplinas científicas. Además, se llevó a cabo un análisis crítico de los principios y fundamentos del Método Singapur y su adaptabilidad al contexto de la bioquímica. Esta revisión se complementó con la experiencia y opiniones de expertos en educación científica y bioquímica.

Los resultados de este estudio revelaron que la aplicación del Método Singapur en la enseñanza de la bioquímica tiene el potencial de mejorar significativamente el proceso de aprendizaje de los estudiantes. Se encontró que este enfoque fomenta el desarrollo de habilidades de pensamiento crítico, promueve la aplicación práctica de conceptos bioquímicos y aumenta la retención de la atención de los estudiantes en el aula. Además, se observó que la integración de tecnología de manera significativa en la enseñanza mediante el Método Singapur puede mejorar la comprensión de conceptos bioquímicos complejos. Estos resultados sugieren que el Método Singapur podría ser una estrategia efectiva para mejorar la enseñanza y el aprendizaje de la bioquímica en entornos educativos.

El Método Singapur se centra en el desarrollo conceptual y la resolución de problemas. Su enfoque visual y concreto podría facilitar la comprensión de conceptos bioquímicos abstractos, ofreciendo una perspectiva diferente a los métodos tradicionales.

La implementación del Método Singapur en la enseñanza de la bioquímica no solo enriquece el aprendizaje de los estudiantes, sino que también les proporciona las herramientas y habilidades necesarias para abordar desafíos científicos de manera efectiva en un mundo en constante evolución. Este enfoque no solo transforma la manera en que se enseña la bioquímica, sino que también moldea a los futuros profesionales de la ciencia, preparándolos para contribuir de manera significativa al avance de la disciplina.

Referencias

Perugachi Cachimuel, M. E. (2023). Aplicación del Método Singapur en la enseñanza de campos eléctricos y magnéticos en el tercero año de bachillerato en la Unidad Educativa Teodoro Gómez de la Torre en el periodo 2021-2022. Trabajo de grado.

Tapia, T. A., & Murillo, A. J. (2020). El método Singapur: sus alcances para el aprendizaje de las matemáticas. Revista muro de la investigación, 5(2), 13-24.

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Evaluación Del Efecto Del Tiempo y El Control De Temperatura Sobre La Composición y La Actividad Antioxidante De *Ganoderma lucidum* Obtenido Por Fermentación en Estado Líquido

Evaluation Of The Effect Of Time and Temperature Control On The Composition an Antioxidante Activity Of *Ganoderma lucidum* Culture Obtained By Fermentation in a Liquid State

Ana María Suarez Rojas[1], Juan Pablo Yasmo Perez[2], Carolina Chegwin Angarita[1], Sergio Andrés Urrego Restrepo[2], Omar David Saldarriaga Ochoa[2]

[1]Grupo de Investigación Química de Hongos Macromicetos, Universidad Nacional de Colombia, Departamento de Química, Bogotá, Colombia.

[2] Aitia biotech S.A.S, Medellín, Colombia.

asuarezro@unal.edu.co

Área Temática: Química de productos naturales y farmacéuticos

Palabras clave: Ganoderma lucidum, fermentación en estado líquido, espectrofotometría, antioxidantes, HPLC.

El Ganoderma lucidum, más conocido como Reishi, es un hongo con propiedades medicinales reconocidas que ha despertado un creciente interés por sus beneficios para la salud. Los cambios en las condiciones de su cultivo pueden influir significativamente en la composición química y, por ende, en sus acciones biológicas. Este estudio se centró en analizar el impacto del control de temperatura y el tiempo de cultivo del Ganoderma lucidum obtenido por fermentación en estado líquido, sobre el perfil del producto biotecnológico y su actividad antioxidante.

Se llevaron a cabo cultivos de Ganoderma lucidum durante 12 y 17 días, con y sin control de temperatura. Las muestras obtenidas se liofilizaron y se realizaron extracciones sucesivas utilizando solventes de diferentes polaridades: cloroformo (baja polaridad), etanol (polaridad media) y agua (alta polaridad). Posteriormente, se emplearon diversos métodos espectrofotométricos para cuantificar grupos de metabolitos como esteroles (Lieberman-Burchard), compuestos fenólicos (Folin-Ciocalteu), azúcares reductores (DNS) y carbohidratos totales (Fenol-Ácido sulfúrico), y se realizó un perfilado por HPLC de los extractos obtenidos. Adicionalmente, se llevaron a cabo ensayos para determinar la actividad antioxidante utilizando los métodos ORAC, FRAP y DPPH.

Los resultados revelaron que hay una mayor concentración de los analitos de interés controlando la temperatura del proceso y a un tiempo de 12 días. En cuanto al perfilado por HPLC, se evidenció la presencia de diversos compuestos con variaciones en los rangos de polaridad trabajados. En cuanto al potencial antioxidante, hay una correlación entre los compuestos fenólicos presentes principalmente en los extractos etanólicos y dicha bioacción. Adicionalmente, se encontró una alta variedad de metabolitos en los diferentes extractos, confirmada por los tiempos de retención en el perfilado químico por HPLC.

Estos resultados son consistentes con estudios previos reportados en la literatura, que han mostrado que las condiciones de cultivo pueden influir significativamente en la composición y las propiedades antioxidantes del Ganoderma lucidum, destacando la importancia de optimizar dichas condiciones para maximizar sus beneficios.

Referencias

Kolniak-Ostek J, Oszmiański J, Szyjka A, Moreira H, Barg E. Anticancer and Antioxidant Activities in Ganoderma lucidum Wild Mushrooms in Poland, as Well as Their Phenolic and Triterpenoid Compounds. Int J Mol Sci. 2022 Aug 19;23(16):9359. doi: 10.3390/ijms23169359. PMID: 36012645; PMCID: PMC9408863.

Silva, D. D. V., & Rigo, E. (2022). Production of mycelial biomass, proteases and protease inhibitors by Ganoderma lucidum under different submerged fermentation conditions. Brazilian Journal of Biology, 82, e240119. https://doi.org/10.1590/1519-6984.240119

Películas de Alginato Cargadas con Tween 80 Para La Desorción de Petróleo Impregnado en Piedras

Desorption Of Impregnated Oil in Rocks Using Alginate Films Loaded with Saqta Root Saponins Applied by Spray Technique

Veliz, Miguel[1], Cavalheiro, Éder[2], Valentin, Juan[4], Dávalos, Juan[5], Valderrama, Ana[1]

[1]Laboratorio de Investigación en Biopolímeros y Metalofármacos, Universidad Nacional de Ingeniería, Lima, Perú.

[2]Laboratório de Análise Térmica, Eletroanalítica e Química de Soluções, Universidad de São Paulo, São Carlos, Brasil.

[4]Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), Madrid, España.

[5]Instituto de Química Física Blas Cabrera, Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), Madrid, España.

ana.valderrama.n@uni.edu.pe

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola

Palabras clave: Alginato, tween 80, petróleo, piedra, desorción.

La explotación y transporte de petróleo por empresas o industrias privadas, donde ocurren con frecuencia accidentes de derrames, generan problemas ambientales que causan daños destructivos al ecosistema del océano y la costa. Este trabajo se basa en un método de recuperación de petróleo a partir de mezclas de polímeros y surfactantes, siendo el alginato y tween 80 sustancias de interés.

Se usó una plancha de calentamiento, agitador magnético, balanza analítica, bureta, pipeta pasteur, soporte universal, nuez, pinza, bagueta, papel filtro rápido, placas Petri, frascos para spray, piedras, pinzas, espátula y vasos de precipitado.

La fase experimental comienza con la caracterización del alginato de sodio comercial mediante técnicas instrumentales de FTIR, ^{1}H-NMR, viscometría capilar y TGA.

Se recolectó piedras de tamaño similar en una zona costera no contaminada por petróleo, en Lima-Perú. Los sprays de alginato se prepararon mediante un diseño experimental con tres variables; %alginato, %surfactante y %plastificante, obteniendo formulaciones con Tween 80 y glicerol como plastificante. A las piedras muestreadas se les aplicó los sprays junto con una solución reticulante de $CaCl_2$. Las piedras muestreadas se sumergieron en petróleo crudo durante unos minutos y luego se dejaron secar al medio ambiente. Se aplicó el spray seleccionado del diseño experimental. Las películas formadas en piedras con y sin petróleo crudo se retiraron y caracterizaron mediante las técnicas instrumentales de FTIR, TGA y SEM. Se realizó un análisis cuantitativo de hidrocarburos totales en la película formada para medir su capacidad de desorción de petróleo.

Como resultado, el spray más adecuado fue aquel con 1 % alginato, 3% surfactante y 5 % plastificante. Debido a la cantidad de surfactante agregado, se formará micelas que estarán rodeadas y unidas a las cadenas poliméricas confiriéndole mejor consistencia al inicio del sprayado sobre la roca, por lo que, el escape de la solución por los poros de la roca se verá disminuido.

Se concluye que, para las formulaciones con surfactante sintético, las más adecuadas son los sprays con mayor %alginato, % tween80 y menor % glicerol.

Referencias

Parikh, V., Gumaste, S. G., & Phadke, S. (2018). Effect of the Interaction Between an Ionic Surfactant and Polymer on the Dissolution of a Poorly Soluble Drug. AAPS PharmSciTech, 19(7), 3040–3047. https://doi.org/10.1208/s12249-018-1125-x

Shi, Z., Li, Y., Dong, L., Guan, Y., & Bao, M. (2021). Deep remediation of oil spill based on the dispersion and photocatalytic degradation of biosurfactant-modified TiO2. *Chemosphere*, *281*(December 2020), 130744. https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.130744

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Síntesis de Nuevos Híbridos Moleculares 4-(4-hidroxi-3-metoxifenil) tetrahidroquinolina/1,2,3-triazol, Compuestos Con Potencial Actividad Anticancerígena

Synthesis Of Novel Molecular Hybrids of 4-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl) Fetrahydroquinoline/1,2,3-Triazole, Compounds With Potential Anticancer Activity

Romero, A.[1], Marín, L.[1], Capacho, W.[1]

[1]Grupo de investigación en compuestos Orgánicos de interés medicinal, CODEIM, Universidad industrial de Santander, Santander, Colombia.

arafrom@uis.edu.co

Área Temática: Química orgánica

Palabras clave: Tetrahidroquinolina, Triazol, Povarov catiónica, Cicloadición 1,3-dipolar, hibridación molecular.

En la búsqueda de agentes farmacológicos más eficientes y selectivos, que puedan hacer frente a enfermedades relacionadas a daño tisular, como enfermedades cardiovasculares, enfermedades neurodegenerativas o inclusive enfermedades relacionadas al cáncer, surge la estrategia sintética de la hibridación molecular, como una herramienta fiable y eficiente para obtener compuestos con promisorias propiedades bioactivas, en muchos de los casos, múltiples actividades biológicas inherentes de los farmacóforo que forman parte del andamiaje del híbrido formado. Por tal razón, el propósito del presente trabajo radica en la obtención eficiente y sencilla de una nueva serie de híbridos moleculares de 4-(4-hidroxi-3-metoxifenil) tetrahidroquinolina enlazados al fragmento 1,2,3-triazol, estructuras químicas que han mostrado promisoria capacidad como agentes biológicamente activos con potencial anticancerígeno.

La metodología empleada para la síntesis de estos híbridos inició con la utilización de anilinas 4-sustituidas para la obtención de N-propargilanilinas. A partir de estas, se procedió a la síntesis de N-propargil-4-(4-hidroxi-3-metoxifenil)-1,2,3,4-tetrahidroquinolinas, mediante la reacción de Povarov catiónica, en condiciones ácidas con 2-metoxi-4-vinilfenol. Estas últimas, sirvieron como precursores clave en la preparación de los nuevos híbridos al involucrar la cicloadición 1,3-dipolar.

Tanto las N-propargil tetrahidroquinolinas como los híbridos resultantes de la combinación con triazol fueron caracterizados exhaustivamente mediante técnicas espectroscópicas como IR, RMN, así como estudios de espectrometría de masas GC-MS y ESI-MS. Estos análisis confirmaron el éxito de la síntesis, logrando rendimientos que oscilaron entre moderados y buenos. Así mismo, se observa, la flexibilidad y capacidad de diversificación de estas metodologías clásicas en la construcción de compuestos que pueden presentar propiedades biológicamente aprovechables en futuros estudios de actividad citotóxica en células.

Referencias

Acelas, M., Kouznetsov, V. V., & Romero Bohórquez, A. R. (2019). Facile and highly diastereo- and regioselective synthesis of novel octahydroacridine-isoxazole and octahydroacridine-1,2,3-triazole molecular hybrids from citronella essential oil. *Molecular Diversity, 23*(1), 183–193.

Ananikov, V. P., Galkin, K. I., Egorov, M. P., Sakharov, A. M., Zlotin, S. G., Redina, E. A., Isaeva, V. I., Kustov, L. M., Gening, M. L., & Nifantiev, N. E. (2016). Challenges in the development of organic and hybrid molecular systems. *Mendeleev Communications, 26*(5), 365–374.

Evaluación De La actividad Anti-inflamatoria y Antibacterial De La Enzima Serratiopeptidasa Aislada De La Bacteria *Serratia marcescens* C8

Evaluation Of The Anti-inflammatory and Antibacterial Activity Of The Enzyme Serratiopeptidase Solated From The Bacterium *Serratia marcescens* C8

Tabares-Villa, FA.[1], Melchor-Moncada, JJ.[1], Zuluaga-Vélez, A.[1], Orozco, LM.[2], Veloza, LA.[2], Sepúlveda-Arias, JC.[1]

[1]Grupo de Investigación Infección e Inmunidad, Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira, Colombia.

[2]Grupo de Investigación Polifenoles, Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira, Colombia.

azuluagav@utp.edu.co

Área temática: Bioquímica

Palabras clave: Serratiopeptidasa, fermentación, actividad anti-inflamatoria, actividad antibacterial.

La respuesta inflamatoria se genera para reparar daños o infecciones que se producen en el tejido, sin embargo, cuando esta respuesta persiste en el tiempo se pueden generar enfermedades inflamatorias crónicas severas (Furman et al., 2019). Actualmente, los AINEs son los medicamentos más utilizados para tratar los eventos inflamatorios, aunque presentan efectos no deseados a nivel cardiovascular y gástrico. La serratiopeptidasa es una metaloproteasa de *Serratia marcescens*, a la cual se le han atribuido múltiples actividades biológicas. En este trabajo se evaluó la actividad antiinflamatoria y antibacterial *in vitro* de la enzima serratiopeptidasa aislada de la bacteria *Serratia marcescens* C8.

Aislado de *Serratia marcescens* C8 obtenido del intestino del gusano de seda híbrido colombiano Pílamo II, Columna de intercambio iónico débil (Bio-Scale Mini Macro-Prep DEAE). Línea celular ATCC Raw 264.7.

Se utilizó una cepa de *Serratia marcescens* C8 para producir serratiopeptidasa. La fermentación se realizó en medio líquido, y luego el producto se purificó mediante filtración y cromatografía. Se identificó la fracción pura de serratiopeptidasa y se determinó sus propiedades bioquímicas. Para establecer la actividad antiinflamatoria se utilizó la línea celular RAW 264.7. Las células fueran tratadas con serratiopeptidasa para determinar los niveles de producción de los mediadores pro-inflamatorios. Finalmente, la actividad antibacterial se evaluó por un ensayo de difusión en pozo con cepa ATCC 25922 de *E. coli*.

Se logró obtener una fracción de la enzima pura con alta actividad proteolítica. La enzima purificada presentó un efecto inhibitorio sobre la producción de óxido nítrico, PGE2, IL-6 y TNF-α. Adicionalmente, se observó que la actividad antibacterial está limitada a las primeras 6 horas de incubación.

Los resultados concuerdan otros autores que afirman que la enzima serratiopeptidasa presenta una alta actividad anti-inflamatoria y antibacterial (Jadhav et al., 2020). Sin embargo, es necesario mejorar la estabilidad enzimática ligada a su auto-proteólisis y a cambios de pH.

Se concluye que a nivel *in vitro* la serratiopeptidasa tiene un efecto antiinflamatorio y antibacterial por lo que se pueden considerar una proteasa con potencial efecto terapéutico.

Referencias

Furman, D., Campisi, J., Verdin, E., Carrera-Bastos, P., Targ, S., Franceschi, C., Ferrucci, L., Gilroy, D. W., Fasano, A., Miller, G. W., Miller, A. H., Mantovani, A., Weyand, C. M., Barzilai, N., Goronzy, J. J., Rando, T. A., Effros, R. B., Lucia, A., Kleinstreuer, N., & Slavich, G. M. (2019). Chronic inflammation in the etiology of disease across the life span. *Nature Medicine*, *25*(12), 1822–1832. https://doi.org/10.1038/s41591-019-0675-0

Jadhav, S. B., Shah, N., Rathi, A., Rathi, V., & Rathi, A. (2020). Serratiopeptidase: Insights into the therapeutic applications. *Biotechnology Reports*, *28*, e00544. https://doi.org/10.1016/j.btre.2020.e0054

Desafíos y oportunidades analíticas en el estudio de los dsiruptores endocrinos en la evaluación del exposoma.

Analytical Challenges and Opportunities in the Study of Endocrine Disruptors in Exposome Assessment.

Barría, F.[1,2,3,4]

[1]Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología de la Universidad de Panamá, Ciudad de Panamá, Panamá.
[2]Centro de Información e Investigación de Medicamentos y Tóxicos, Vicerrectoría de Investigación y Postgrado de la Universidad de Panamá, Ciudad de Panamá, Panamá.
[3]Grupo de Investigación, Innovación y Desarrollo en Química Aplicada, Vicerrectoría de Investigación y Postgrado de la Universidad de Panamá, Ciudad de Panamá, Panamá.
[4]Programa de Maestría en Toxicología, Vicerrectoría de Investigación y Postgrado de la Universidad de Panamá, Ciudad de Panamá, Panamá.

Correo del presentador: felipe.barria@up.ac.pa

Palabras clave: Exposoma Humano y Metaboloma, Compuestos Disruptores Endocrinos, Espectrometría de Masas, Contaminantes Emergentes, Cromatografía

Área Temática: Química Analítica.

Esta revisión se centra en el estudio de los Disruptores Endocrinos (EDCs) y en el enorme desafío que comprende el definir una pequeña parte del exposoma químico. Las estrategias analíticas aplicadas en el contexto de exposómica han resultado ser una gran herramienta para esclarecer el papel de los EDCs en lo que a su exposición se refiere. Esta revisión ofrece una visión holística desde la perspectiva de la química analítica y de sus capacidades técnicas y verdes para la obtención de resultados valiosos (Marín-Sáez et al., 2024).

El desarrollo continuo de métodos analíticos de alto rendimiento ha permitido la cobertura simultánea del metaboloma y de compuestos químicos ambientales, No existe un técnica única capaz de abarcar completamente el espacio químico, por ende la combinación de metodologías dirigidas y no dirigidas han resultado altamente beneficiosa, constituyendo una mejoraría en la solidez de los resultados; aumentando el rendimiento analítico y reduciendo significativamente los costos y tiempos da análisis, posibilitando el estudio de grandes cohortes humanas enfocadas en la definición de los principales componentes químicos del exposoma huamano (Hyötyläinen, 2021).

El abordaje actual referente a la exposómica, ha llevado a los químicos analíticos a implementar diversas estrategias metodológicas basadas en espectrometría de masas de alta resolución aplicadas en una gran variedad de estudios actuales pero que evidencian continuante sus limitaciones.

Para el desarrollo de estas capacidades analíticas las separaciones por cromatografía líquida son las más ampliamente utilizadas, mientras que la cromatografía de gases se encuentra un tanto subutilizada debido principalmente a la complejidad de la adecuación de muestras y naturaleza química de los analitos. La selección del instrumental analítico y las técnicas de tratamiento/adecuación de muestras son fundamentadas principalmente en los enfoques de funcionabilidad en base a costos (inversión en equipos, gastos operativos y de mantenimiento, nivel de especialización requerido, insumos) y sus posibles beneficios (mejoras en sensibilidad, cobertura, reproducibilidad, rendimiento y facilidad de uso); también se debe incluir la necesidad de inversiones tecnológicas (actualizaciones avanzadas de hardware) y las estrategias de bajo costo con alto potencial de beneficio (uso de diferentes fases de columna y para un mejor fraccionamiento de muestras).

Referencia:

Hyötyläinen, T. (2021). Analytical challenges in human exposome analysis with focus on environmental analysis combined with metabolomics. In *Journal of Separation Science* (Vol. 44, Issue 8, pp. 1769–1787). John Wiley and Sons Inc. https://doi.org/10.1002/jssc.202001263

Marín-Sáez, J., Hernández-Mesa, M., Cano-Sancho, G., & García-Campaña, A. M. (2024). Analytical challenges and opportunities in the study of endocrine disrupting chemicals within an exposomics framework. In *Talanta* (Vol. 279). Elsevier B.V. https://doi.org/10.1016/j.talanta.2024.126616

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

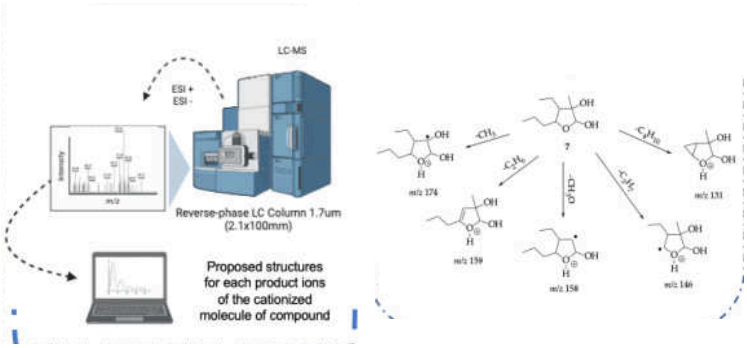
Correlación de Espectros de MS/MS con Mecanismos de Fragmentación para la Identificación de Metabolitos Secundarios: Un Enfoque Basado en la Estructura Molecular

Cubilla-Rios, Luis
Laboratorío de Bioorgánica Tropical, Departamento de Química Orgánica, Universidad de Panamá.
luis.cubilla@up.ac.pa

Palabras claves: Espectrometría de masas en tándem (MS/MS), Mecanismo de Fragmentación, Hongos endófitos, Identificación de compuestos, Extractos orgánicos

El análisis por espectrometría de masas en tándem (MS/MS) es una herramienta eficaz para la identificación y detección de compuestos con estructuras conocidas en extractos orgánicos derivados de cultivos de hongos endófitos. Esta técnica permite fragmentar los iones precursores seleccionados, generando espectros característicos que revelan información detallada sobre la estructura molecular de los compuestos presentes. Los espectros de fragmentación obtenidos pueden correlacionarse con bases de datos para identificar compuestos específicos, mientras que el análisis de los patrones de fragmentación, a través de mecanismos conocidos, proporciona mayor certeza en la identificación. Adicionalmente, el estudio de la energía de ionización y la distribución de la intensidad de los fragmentos permite entender por qué algunos fragmentos aparecen con mayor intensidad que otros. La representación gráfica de los mecanismos de fragmentación y la relación entre la estabilidad de los fragmentos y su abundancia relativa puede ilustrar las diferencias en la energía requerida para romper ciertos enlaces dentro de las moléculas, aportando una interpretación más profunda de los espectros MS/MS. En resumen, MS/MS es una herramienta precisa y poderosa para caracterizar compuestos en mezclas complejas como los extractos de hongos endófitos.

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ



Venenos de Escorpión en Panamá: conocimientos actuales y perspectivas científicas

Salazar, M.[1, 2]
[1]Universidad de Panamá, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Departamento de Bioquímica, Ciudad de Panamá, Panamá
[2]Universidad Panamá, Centro de Investigación e Información de Medicamentos y Tóxicos (CIIMET), Facultad de Medicina, Ciudad de Panamá, Panamá

marcos.salazar@up.ac.pa
Área Temática: Bioquímica
Palabras claves: veneno de escorpión, electroforesis, bioprospección, HPLC.

Los escorpiones son artrópodos pertenecientes a la clase Arachnida, conocidos por su veneno. Su registro fósil data de hace más de 430 millones de años, lo que los convierte en uno de los primeros animales en colonizar la tierra. En contraste, el Istmo de Panamá se formó hace aproximadamente 3 millones de años, un evento geológico clave que permitió el intercambio biológico entre América del Norte y América del Sur, conocido como el Gran Intercambio Biótico. Este contexto histórico resalta la antigüedad de los escorpiones en comparación con la reciente formación del istmo, lo que indica que las especies actuales de escorpiones han evolucionado para adaptarse a este nuevo ecosistema.

En Panamá, se han detectado 16 especies de escorpiones, que suelen ser de la familia Buthidae y estan dos géneros relevantes: *Centruroides* y *Tityus*. Estas especies presentan variaciones en su ubicación geográfica, conducta y tóxicidad de su veneno. Caracterizar un veneno requiere examinar su composición bioquímica, detectando proteínas, péptidos y otras biomoléculas que aportan a su toxicidad. Para este procedimiento, técnicas como la proteómica y la cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) resultan fundamentales, pues facilitan la separación e identificación de elementos tóxicos y no tóxicos. Otro método, como la electroforesis en gel de poliacrilamida, facilita el estudio de las propiedades del veneno.

En la investigación, la expresión heteróloga de las toxinas de escorpión es un instrumento esencial. Se trata de generar toxinas particulares en sistemas como bacterias o levaduras, lo que simplifica su estudio y uso en la creación de antivenenos. La fabricación de antivenenos se fundamenta en la inmunización de animales con dosis mínimas de veneno o toxinas específicas, creando anticuerpos que pueden contrarrestar sus efectos. No obstante, la bioprospección de venenos de escorpión trasciende, investigando su capacidad para encontrar compuestos antimicrobianos, antifúngicos y anticancerígenos. Los péptidos contenidos en estos venenos han demostrado tener un potencial positivo contra patógenos resistentes y células malignas, lo que abre nuevas rutas para el avance de medicamentos.

ANÁLISIS DEL IMPACTO DEL CÓCTEL DE BACTERIÓFAGOS EN EL CULTIVO DE LA MICROALGA *Desmodesmus communis*.

ANALYSIS OF THE IMPACT OF THE BACTERIOPHAGE COCKTAIL IN THE CULTURE OF *Desmodesmus communis*.

Batista, A.[1,2], Ramírez Sánchez, I.[2], Veyrand Quirós, B.[2], Bauda, K.[2,3], Quiroz Guzmán, E.[2], Arredondo Vega, B.O.[2]

[1]Grupo de Investigación en Biotecnología de Microalgas-CIPNABIOT, Universidad Autónoma de Chiriquí, David, Panamá.
[2]Laboratorio de Biotecnología de Microalgas y Bacteriófagos. Centro de Investigaciones Biológicas del Noroeste (CIBNOR). La Paz, Baja California Sur, México.
[3]Tecnológico Nacional de México, Campo Bahía de Banderas, Nayarit, México.

Correo electrónico: ariadna.batista@unachi.ac.pa

Área Temática: Bioquímica

La eficacia y la posible aplicación de la terapia con bacteriófagos como inductores en el mejoramiento de la calidad nutritiva de cultivos microalgales que se utilizan como alimento vivo en instalaciones de acuicultura, aún no ha sido estudiada. El objetivo principal de este estudio fue determinar la efectividad de un cóctel de bacteriófagos en el cultivo de *Desmodesmus communis* y su impacto en la calidad nutritiva de la biomasa microalgal. En el presente estudio se empleó un cóctel de bacteriófagos en el cultivo de la microalga *Demosdesmus communis* (CIB53). Los cultivos control y con el cóctel, se llevaron a cabo en las siguientes condiciones de laboratorio: temperatura 23-25 °C, irradiancia 150 µmol fotón m^{-2} s^{-1}, ciclo de luz: oscuridad 12:12h, pH 7.8, medio f/2. Todos los experimentos se realizaron por cuadruplicado. A los 10 días, la biomasa se cosechó por centrifugación, se lavó con agua destilada estéril, se congeló y liofilizó. Se pesaron 5 mg para cuantificar por métodos espectrofotométricos (Lowry,1951; Ohemeng-Datta, 2018; Bligh y Dyer, 1959), el contenido total de proteínas, carbohidratos y lípidos (porcentaje peso seco). Los ácidos grasos (µg/mg peso seco) y pigmentos (ng/mg peso seco) se cuantificaron por cromatografía GC-FID y HPLC-DAD, respectivamente. Los resultados fueron: proteínas (control l1.9±0.66; coctel 23.9 ±2), carbohidratos (control 23.9±3.14; coctel 14.9±3.3), lípidos (control 20.1 ±2.9; coctel 21.0 ±1.6). Ácidos grasos en control: 18:1ω9 (30.7±1.2) > 18:3ω3 (21.3±1.4)> 16:0 (15.5±1.0)> 18:2ω6 (12.5±0.8); coctel: 18:3ω3 (34.6±5.0)> 18:1ω9 (13.3±0.9)> 16:0 (12.6±1.7)>18:2ω6 (9.6±0.9). Pigmentos en control: clorofila *a* (0.14±0.01), clorofila *b* (0.007±0.005), luteína (0.038±0.03), β-caroteno (0.011±0.005), violaxantina (0.004±0.003); coctel: clorofila a (2.67±0.49), clorofila *b* (0.157±0.03), luteína (0.39±0.07), β-caroteno (0.142±0.038), violaxantina (0.043±0.007). Se propone el uso de bacteriófagos como una herramienta potencial para mejorar la calidad nutritiva de la biomasa de la microalga *Desmodesmus communis*.

Palabras clave: mejoramiento del cultivo de *Desmodesmus*, acuicultura, fagoterapia, calidad nutritiva.

- Referencias: Lowry, O., Rosebrough, N., Farr, A. L., & Randall, R. (1951). Protein measurement with the Folin phenol reagent. *Journal of biological chemistry*, *193*(1), 265-275.
- Bligh, E. G., & Dyer, W. J. (1959). A rapid method of total lipid extraction and purification. *Canadian journal of biochemistry and physiology*, *37*(8), 911-917

Uso De La Fluorescencia Tridimensional y los EEMs Para La Caracterización De La Composición Espectroscópica Del Agua

Mario L. Miranda1,2,3, Víctor Cuadra4, José Robinson-Duggon3,5, José Villarreal1,2

1. Universidad de Panama, Departamento de Química Analítica
2. Universidad de Panama, Vicerrectoría de Investigación y Posgrado, Laboratorio de la Calidad del Agua y Aire
3. Sistema Nacional de Investigación y posgrado, secretaria nacional de Ciencia y Tecnología.
4. Universidad de Panama, Escuela de Química
5. Universidad de Panama, Departamento de Bioquímica

Resumen
La fluorescencia tridimensional (FT) y los espectros de emisión / excitación de matriz (EEMs) son técnicas avanzadas utilizadas para la caracterización de la composición espectroscópica del agua. La FT se basa en la medición de la fluorescencia emitida por una muestra cuando se excita con luz en un rango específico de longitudes de onda. En combinación con los EEMs, que son mapas tridimensionales de la fluorescencia, estas técnicas permiten analizar la interacción de las moléculas en el agua con la radiación electromagnética. Los EEMs proporcionan información crucial sobre la composición molecular del agua, ya que permiten identificar y diferenciar entre compuestos orgánicos e inorgánicos, como los ácidos húmicos disueltos, metales pesados, contaminantes emergentes y materia orgánica disuelta. Los mapas espectrales generados por los EEMs contienen una serie de espectros que combinan la longitud de onda de excitación, la longitud de onda de emisión y la intensidad de la fluorescencia, lo que permite un análisis detallado de la naturaleza de las sustancias presentes en el agua. En el contexto de la caracterización del agua, la FT y los EEMs tienen aplicaciones en la monitorización de la calidad del agua, en la identificación de contaminantes y en el seguimiento de procesos naturales o antropogénicos que afectan a los cuerpos de agua. Además, estas técnicas permiten detectar compuestos en concentraciones muy bajas, lo que resulta esencial para estudios de contaminación ambiental y evaluación de riesgos.

Referencias
- Garaba S. P., Albinus, M., Bonthond, G., Flöder, LS., Miranda – Montenegro, M.L., Rhode, S., Yong, J.Y.L., Wollschläger, J. (2023). Bio-optical properties of cyanobacterium Nodularia spumigena. Earth Syst. Sci. Data. Aceptado, https://doi.org/10.5194/essd-2023-23.

- Cuadra, V., Lezcano, R., Bayard, C., Villarreal, J., Robinson-Duggon, J., Miranda – Montenegro, M. L. (2023). Los microplásticos en el entorno acuático: Un vistazo a la cinética, mecanismo de degradación, impacto ambiental y en la salud humana. Vida Natural. DOI: https://doi.org/10.59722/vn.v1i1.612.

-Martínez González, V.S., Guerrero Rivera, S., Mora-Longa, G., Klagges Ormeño, C., Moreno Araneda, M., Miranda – Montenegro, M. L. Palacios Peñaranda, M.L., Chaurra Arboleda, A.M., Purca Cuicapusa, S. R., Robinson-Duggon, J., Vega-Baudrit, J. R. (2023). La problemática de los micro y nanoplásticos en las costas americanas del Océano Pacífico. Mundo Nano. https://doi.org/10.22201/ceiich.24485691e.2023.30.69783.

Miranda M.L., Osterholz H., Helge G – A, Bruhnke P., Dittmar T., Zielinski O. (2020). Impact of UV radiation on the transformation of DOM on molecular level using FT-ICR-MS and PARAFAC. https://doi.org/10.1016/j.saa.2020.118027.

Estudio Del Potencial Fertilizante De Un Compuesto Orgánico Mineral, Y Su Aplicación Piloto En Cultivo De Frijol

Study Of The Fertilizing Potential Of an Organic Mineral Compound, and Its Pilot Application in Bean Crops

Herrera, B[1], Vargas, Y.[1,2]

[1]Grupo de investigación en Química Ambiental y Agrícola Laboratorio Químico de Consultas Industriales y Laboratorio Químico de Suelos, Escuela de Química, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.

bmheragu@uis.edu.co

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola

Palabras claves: pedúnculo, plátano, lutita, sienita, fertilizante.

La búsqueda de alternativas sostenibles para mejorar la calidad del suelo y aumentar la productividad agrícola es una prioridad en la región de Santander. En este contexto, se ha desarrollado un estudio enfocado en la creación de fertilizantes orgánico-minerales adaptados a las características específicas de esta región, rica en diversos insumos naturales. El presente trabajo se centra en la utilización de tres componentes principales: los pedúnculos de plátano, rocas sedimentarias e ígneas procedentes de las áreas de Mogotes y Curos. Con estas mezclas buscamos enmendar suelos con bajos niveles de materia orgánica y nutrientes, ofreciendo una solución a bajos costos para mejorar la calidad del suelo y promover la agricultura sostenible en la región.

Para la preparación del fertilizante, se utilizó el pedúnculo de plátano como biomasa, un material de desecho de la siembra del plátano. Como componentes inorgánicos, se emplearon rocas de lutita y sienita.

La caracterización fisicoquímica de los componentes del fertilizante se realizó mediante análisis de gravimetría, titrimétricos, espectrofotometría de absorción atómica, UV-VIS, fluorescencia y espectroscopia de rayos X.

Con base en caracterización fisicoquímico de los insumos, se realizó un estudio experimental con un cultivo de frijol radical (*Phaseolus vulgaris)* y tres tipos de fertilizantes, comparados con un abono comercial y un control, para analizar cambios en el suelo, evidenciando alcalinización del pH y aumento de nitrógeno. Se evaluó el crecimiento vegetal mediante análisis morfológicos, apoyados por análisis estadístico ANOVA.

El fertilizante diseñado, que utiliza biomasa de pedúnculo de plátano, es una solución prometedora para mejorar el suelo. Su composición permite corregir el pH y agregar nutrientes esenciales como el nitrógeno y la materia orgánica, esenciales para el crecimiento de las plantas. La inclusión de minerales de lutita y sienita mejora aún más las propiedades del suelo, especialmente su contenido de sílice, lo que beneficia el desarrollo de las plantas.

Esta formulación de fertilizante no solo corrige las deficiencias identificadas en el suelo, sino que también garantiza un suministro continuo de nutrientes esenciales para el desarrollo de cultivos como el frijol.

Referencias

Jariwala, H., Haque, F., Vanderburgt, S., Santos, R. M., & Chiang, Y. W. (2022). Mineral–soil–plant–nutrient synergisms of enhanced weathering for agriculture: short-term investigations using fast-weathering wollastonite skarn. *Frontiers in Plant Science*, *13*.

Valladares, L. D. L. S., Kooyip, J. J., Borja-Castro, L. E., Valerio-Cuadros, M. I., Valencia-Bedregal, R. A., Velazquez-Garcia, J. J., ... & Dominguez, A. B. (2022). Characterization of Spanish River Carbonatite (SRC) for agricultural fertilizer. *Hyperfine Interactions*, *243*(1), 19.

Identificación de Plaguicidas por Cromatografía Gaseosa y Cromatografía Líquida de Alta Resolución Acopladas a Espectrometría De Masas en El Fruto De Piñas Recolectadas en La Ciudad De Santiago de Cali.

Identification Of Pesticides By Gas Chromatography and High-Performance Liquid Chromatography Coupled To Mas Spectrometry in Pineapple Fruit Collected in The City Of Santiago De Cali.

Yanes, B.[1], Valencia, S.[1] Gutiérrez-Moreno, N. J. [1], Peña-Herrera, J. M.[2]

[1]Grupo de Investigación en Química y Biotecnología QUIBIO, Universidad Santiago de Cali, Cali, Colombia.

[2]Grupo de Investigación Ciencia de Materiales Avanzados, Universidad Nacional de Colombia Sede Medellín, Medellín, Colombia.

bieriz.yanes00@usc.edu.co

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola

Palabras clave: Piña; Plaguicidas; Cromatografía Líquida; Cromatografía Gaseosa, Espectrometría de masas.

Para garantizar que los cultivos cumplan con los parámetros de calidad para su comercialización se emplean agroquímicos como los plaguicidas, para controlar y prevenir plagas y enfermedades. Dado que la piña es uno de los principales productos de exportación y consumo en Colombia, priorizado como una de las cadenas productivas del subsector frutícola en la región del Valle del Cauca, Colombia, se busca identificar por medio de técnicas cromatográficas la presencia de residuos de plaguicidas en el fruto de piñas recolectadas en la ciudad de Santiago de Cali.

La metodología se dividió en dos fases: La primera consistió en el muestreo y la caracterización botánica y fisicoquímica de 12 piñas en tres diferentes estados de maduración, donde se evaluaron parámetros como peso, % de cáscara, % de pulpa, % de corona, % humedad, % cenizas, % acidez, ^{0}Brix y pH. La segunda fase, se enfocó en la evaluación de la presencia de 501 compuestos agrotóxicos, principalmente plaguicidas, para los cuales se realizó la extracción de los analitos con la metodología QuEChERS, y la identificación por cromatografía gaseosa y líquida acopladas a espectrometría de masas (GC-MS/MS y LC-HRMS).

Se detectó la presencia de dos compuestos mediante cromatografía líquida. El tiabendazol, fungicida de amplio espectro postcosecha, en 2 de 4 piñas verdes con una concentración promedio de 0,031 mg/kg, en 3 de 4 piñas medianamente maduras con concentración de 0,033 mg/kg y en 1 de 4 piñas maduras con concentración inferior al límite de cuantificación. Al comparar estos resultados con los límites máximos de residuos (LMR) para frutas tropicales (5 – 15 mg/kg), se observa que no exceden estos valores. El otro compuesto detectado fue fosfato de tris(2-cloroetilo), empleado para la fabricación de plastificantes y otros productos, cuya presencia se detectó en todas las muestras con concentraciones por debajo de los límites de cuantificación.

Aunque se encontraron residuos de tiabendazol, estos no superan los LMR. El fosfato de tris(2-cloroetilo) está en concentraciones de trazas, por debajo del límite de cuantificación. Por lo tanto, no implican un riesgo inmediato para la salud; sin embargo, exposiciones prolongadas pueden ser nocivas para el ser humano.

Referencias

Costa Rica. Ministerio de Agricultura y Ganadería. Servicio Fitosanitario del Estado. Manual de buenas prácticas agrícolas para la producción sostenible del cultivo de la piña (Ananas comosus L.). -- 2 ed. -- San José, C.R. : MAG-SFE/IICA/INTA/MINAE/MS/AYA, 2019. 88 páginas ISBN 978-9930-559-09-3.

Ministerio de Salud y Protección Social de Colombia, Minsalud. (2023). Calidad e inocuidad de alimentos. https://www.minsalud.gov.co/salud/Paginas/inocuidad-alimentos.aspx

Siraj, J., & Ejeta, F. (2022). Analysis of pesticide residues in fruits and vegetables using gas chromatography-mass spectrometry: a case from West Omo and Bench-Sheko Zone, Southwest Ethiopia. International Journal of Environmental Analytical Chemistry, 104(3), 531–551. https://doi.org/10.1080/03067319.2021.2020769

Ulibarry, P. G. (2019). Efecto de los plaguicidas sobre la salud humana Exposición e impactos. https://obtienearchivo.bcn.cl/obtienearchivo?id=repositorio/10221/26823/2/Efecto_de_los_plaguicidas_en_la_Salud.pdf

Zheng, X., Ma, Z., & Zhang, D. (2020). Synthesis of Imidazole-Based Medicinal Molecules Utilizing the van Leusen Imidazole Synthesis. Pharmaceuticals, 13(3). https://doi.org/10.3390/PH13030037

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Quenching Del Oxígeno Singulete Por Antioxidantes Naturales y Sintéticos: Estudio Cinético

Quenching Of Singlet Oxygen By Natural and Synthetic Antioxidants: Kinetic Study

Diaz-Uribe, C. Vallejo, W.

Grupo de Investigación en Fotoquímica y Fotobiología, Universidad del Atlántico, Barranquilla, Colombia.

carlosdiaz@mail.uniatlantico.edu.co

Área Temática: **Química Física**

Palabras clave: Antioxidantes, estrés oxidativo, estado estacionario, oxígeno singulete

El oxígeno molecular singulete ($^1O_2$) es una de las principales especies reactivas responsables de los efectos citotóxicos del tratamiento fotodinámico y causante de estrés oxidativo (EO). Este proceso está relacionado con el origen de una variedad de enfermedades degenerativas como cáncer, diabetes, cardiopatías, entre otras. Para contrarrestar el EO, existen moléculas antioxidantes (naturales o sintéticas) que al interaccionar con el $^1O_2$ previenen la oxidación de sustancias de interés biológico, generalmente mediante un efecto de "apagamiento" (quenching). Algunos compuestos naturales no siempre son eficientes, por lo que se hace necesario estudiar otros tipos de moléculas con una mayor capacidad de reacción. En este trabajo, se muestra el estudio de la capacidad antioxidante de flavonoides obtenidos de extractos naturales y de compuestos sintéticos como chalconas e híbridos moleculares fusionados tiazolo-pirazinona contra el $^1O_2$. El oxígeno singulete fue generado en la oscuridad por la reacción del Na_2MoO_4 y H_2O_2 mediante una microemulsión tipo micela invertida. El rubrero fue utilizado como reactivo indicador de la presencia de oxígeno singulete, pues este genera un endoperóxido mediante la reacción de ciclo adición tipo [4π + 2π]. Los métodos in vitro, como la determinación de las constantes de velocidad global de quenching del $^1O_2$ (k_Q), son ampliamente utilizados para dar una idea aproximada de la actividad antioxidante compleja que ocurren in vivo. Para tal fin, en este trabajo se realizó un estudio cinético basado en un modelo de estado estacionario derivado de una relación lineal de Stern-Volmer. En los resultados de este trabajo se evidencia que el sustituyente en los sistemas aromáticos ejerce una influencia sobre la constante de velocidad. Finalmente, se determinaron las constantes de velocidad global para cada uno de los compuestos estudiados, encontrándose valores del orden de 10^7 a 10^8 $M^{-1}s^{-1}$, lo que sugiere que estas sustancias pueden contribuir a la protección del daño oxidativo en los sistemas biológicos.

Referencias:

Monsour, C. G., Tadle, A. C., Tafolla-Aguirre, B. J., Lakshmanan, N., Yoon, J. H., Sabio, R. B., & Selke, M. (2023). Singlet Oxygen Quenching by Resveratrol Derivatives. Photochemistry and photobiology, 99(2), 672–679. https://doi.org/10.1111/php.13704

Mukai, K., Hirata, M., Ito, J., Shiomi, T., Nakagawa, K., & Nagaoka, S. I. (2020). Kinetic Study of Singlet-Oxygen Quenching and Aroxyl-Radical Scavenging Activities of Vitamin E Homologs and Fatty Acids Present in Vegetable Oils. Journal of oleo science, 69(1), 7–22. https://doi.org/10.5650/jos.ess19217

Talleres De Bioquímica

Biochemistry Workshops

Cecilia I. Díaz V.

Universidad de Panamá, Facultad de Medicina,Departamento de Bioquímica y Nutrición,Panamá

cecidiazvelarde@outlook.com

Área Temática: Enseñanza de la Bioquímica

Palabras claves. Objetivos específicos, estructuras, funciones, relaciones, mapas metabólicos

La Bioquímica Humana es uno de los cursos básicos de las carreras de las Ciencias de la salud. En el programa de estudios de la carrera de Medicina es un curso de 8 créditos, 4 de teoría, 2 de talleres y 2 de laboratorios. Este Manual de Talleres consta de una introducción, una guía de temas de Bioquímica, objetivos generales, objetivos específicos, material de apoyo docente para cada tema, como, por ejemplo, estructuras de aminoácidos, estructuras de proteínas y cada tema con su bibliografía

Los temas de los talleres son Agua e Iones, Estructuras de aminoácidos, Albúmina, Hemoproteínas, Cofactores Enzimáticos, Introducción a la Bioenergética, Ciclo de Krebs, Deficiencia del complejo de la Piruvato DH sensible a la Tiamina, Ciclo de Krebs, Glúcidos, Especies Reactivas de Oxígeno, Insulina, Lípidos. Además, en el manual se incluyen ejercicios de repaso de los diferentes temas en las modalidades de preguntas de escogencia, comparación, relación y desarrollo.

Este manual fue elaborado con el fin de incorporar nuevas metodologías de enseñanza-aprendizaje, tales como grupos de discusión, lluvia de ideas, estudio de casos para desarrollar en el estudiante, las capacidades de análisis, síntesis, integración y las competencias de saber ser.

Referencias

Cecilia I.Díaz V., Tomás Diez G., Myriam Fernández O., Euris Bultrón.,Nadina de Metzner(2008) Talleres de Bioquímica. Manual para estudiantes de la carrera de Medicina. Panamá.Derechos Reservados 2005 Ministerio de Educación. Registro no. 426

R.K.Murray &al. (2006) Bioquímica de Harper. El Manual Moderno, S.A. de C.V. México

Defensas Antioxidantes Endógenas En Jóvenes Adultos De La República De Panamá

Endogenous Antioxidant Defenses in Young Adults Of The Republic Of Panama

Myriam.Fernández O. (qepd), Cecilia.I.Díaz V.[1]

[1]Departamento de Bioquímica y Nutrición, Facultad de Medicina, Universidad de Panamá

cecidiazvelarde@outlook.com

Área Temática: Bioquímica

Palabras claves. Estrés oxidativo. Enzimas antioxidantes, Superóxido Dismutasa, Catalasa, Glutatión Peroxidasa, Glutatión Reductasa

Este proyecto de investigación tiene como propósito evaluar el sistema de defensa antioxidante endógena mediante la determinación en sangre de las actividades de las enzimas antioxidantes, Superóxido Dismutasa, Catalasa, Glutatión Peroxidasa y Glutatión Reductasa.

Se hizo la captación de voluntarios, mujeres y hombres panameños, jóvenes de 20 a 29 años que habitan en la República de Panamá. La población captada debía cumplir con los criterios de inclusión, a los voluntarios preseleccionados se les tomaron medidas antropométricas y un personal médico les realizó el examen físico. (Aval de la Comisión Nacional de Bioética de la investigación)

Luego de la extracción de sangre y procesamiento de las muestras se realizaron los análisis bioquímicos por técnicas de espectrometría en UV y en visible con los siguientes equipos Espectrofotómetro Shimadzu UV1603 y Espectrofotómetro con lector de microplacas Epoch, BioTek. Las metodologías utilizadas para las determinaciones de las actividades enzimáticas son las siguientes, Superóxido Dismutasa, kit marca Randox; Catalasa, método cinético modificado de la descomposición del peróxido de hidrógeno; Glutatión Peroxidasa, método de Paglia y Valentine y Glutatión Reductasa, kit marca Randox

Se presentan 1. los resultados de las actividades de las enzimas antioxidantes de una población panameña de edad media 22 años. 2. Se comparan con resultados de otros países, influenciados por estilos de vida y factores ambientales. 3.Se presentan valores de las relaciones de las enzimas antioxidantes.

Referencias

Esther Viedda P.,Lisvelt Gómez Robles,Ibl Reyna Campaña Marrero.(Enero Marzo 2017).Revisión del Estrés oxidativo. Correo Científico, vol.21,no.1, Holguín. Vasudevan, SreekumariS., KannanVaidyanathan(2011). Textbook of Biochemistry for Medical Students. Sixth edition.New Delhi. Jaypee Brothers Medical Publishers

Evidencia De Los Efectos Del Medioambiente Sobre La Durabilidad Del Concreto en Panamá

Evidence of Environmental Effects on Concrete Durability in Panama

Hernández B., C.[1], Gómez, N.[2], Villar, J.[3],Sánchez, J.[3], Espinosa, A.[3], Escobar, E.[3], Vergara, F.[3], Rodríguez, J.[2], Mudarra, M.[2], Pazmiño, J.[3]

[1]Facultad de Ciencias y Tecnología, Universidad Tecnológica de Panamá, Panamá, Panamá

[2]Facultad de Ingeniería Civil, Universidad Tecnológica de Panamá, Panamá, Panamá

[3]Centro Experimental de Ingeniería, Universidad Tecnológica de Panamá, Panamá, Panamá

[4]Facultad de Ingeniería Civil, Universidad Tecnológica de Panamá, Panamá, Panamá

cecilio.hernandez@utp.ac.pa

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola

Palabras clave: concreto, FTIR, SEM-EDS, SEM-BSD, carbonatación.

El concreto, uno de los materiales de construcción más utilizados, está expuesto a diversos factores ambientales que pueden afectar su durabilidad y propiedades. Este estudio analiza los efectos del medioambiente sobre el concreto en Panamá, utilizando técnicas avanzadas como la espectroscopía infrarroja de transformada de Fourier (FTIR), la microscopía electrónica de barrido con detección de electrones retrodispersados (SEM-BSD) y con espectroscopía de dispersión de energía (SEM-EDS).

Se recolectaron muestras de concreto procedentes de edificaciones de diferentes regiones de Panamá: Ciudad de Panamá, Los Santos y Coclé. Las técnicas de FTIR se utilizaron para identificar las bandas de absorción específicas de los componentes hidratados, mientras que con SEM-EDS se permitió la determinación de la concentración de elementos en las muestras. Con la técnica SEM-BSD se evalúa la morfología y microdefectos como microfisuras y microporos.

Por FTIR se detectaron bandas de absorción a 1417 cm^{-1} y 872 cm^{-1}, asociadas con la presencia de carbonato de calcio. SEM-EDS reveló una mayor concentración de calcio en las muestras de Panamá y Los Santos en comparación con Coclé, confirmando la presencia de carbonato de calcio como producto principal de la carbonatación. SEM-BSD mostró estructuras con cristales de diferentes formas y microfisuras en Panamá y Los Santos, mientras que en Coclé se observó una estructura densa, en mejor estado, pero con microfisuras.

El estudio demuestra que el medioambiente influye notablemente en la composición y estructura del concreto en Panamá. La carbonatación y la formación de microfisuras son evidentes en el concreto procedente de las regiones evaluadas, destacando la necesidad de implementar medidas preventivas para prolongar la vida útil de las estructuras de concreto.

Referencias

De Sánchez and C. Hernández, "Estudio del efecto ambiental industrial y marino sobre concreto reforzado expuesto en dos ciudades del pacífico panameño," Revista I+D Tecnológico, vol. 17, no. 2, 2021.

C. Hernández, J. Villar, J. De La Cruz Sánchez, A. Avendaño, F. Vergara, E. Escobar, and A. Espinosa, "Effects of tropical climate on public buildings in Panama," in Proc. 8th International Engineering, Sciences and Technology Conference (IESTEC), 2022, pp. 810-813.

Síntesis de Nuevos Dipeptoides Con Actividad Contra La Enzima M1 Alanilaminopeptidasa

Synthesis Of Novel Dipeptoids With Activity Against The Enzyme M1 Alanylaminopeptidase

Alonso, D.[1], Navas-López, M.[1], González-Balceiro, J.[2], Rodríguez, M.A.[2], García-Rivera, D.[1], Coro-Bermello, J.[1]

[1]Laboratorio de Síntesis Química y Biomolecular. Facultad de Química. Universidad de La Habana. Cuba.

[2]Centro de Estudio de Proteínas. Facultad de Biología. Universidad de La Habana. Cuba.

corobermellojulieta@gmail.com

Área Temática: Bioquímica

Palabras clave: M1 Alanilaminopeptidasa, *Plasmodium falciparum*, Reacción Ugi-4C.

La malaria es una enfermedad parasitaria humana causada principalmente por el protozoo *Plasmodium falciparum*. El aumento de la resistencia de los parásitos a los fármacos actuales determina la relevancia de encontrar nuevos tratamientos contra un buen blanco biológico. La enzima M1 Alanilaminopeptidasa de *P. falciparum* (PfA-M1), que es esencial para el desarrollo del parásito en los eritrocitos humanos. La búsqueda de compuestos inhibidores de la enzima resulta una estrategia adecuada para el desarrollo de potenciales fármacos para el tratamiento de esta patología.

Desde hace una década nuestro grupo trabaja en la búsqueda de nuevos inhibidores de PfA-M1. Siguiendo esta línea de investigación se sintetizaron 10 nuevos dipeptoides, que pueden considerarse péptidos miméticos de la bestatina, mediante la reacción de Ugi-4C. Las diez moléculas obtenidas se caracterizaron mediante técnicas de HPLC, RMN mono y bidimensional y ESI-MS. De esta manera quedó asignada inequívocamente la estructura de cada compuesto. Por último, se realizó un ensayo cinético para evaluar la inhibición *in vitro* de la enzima PfA-M1. Uno de los nuevos dipeptoides se pudo clasificar como un inhibidor potente (submicromolar). Este compuesto resulta promisorio para continuar los estudios con la finalidad de obtener nuevos fármacos para el tratamiento de la enfermedad de la malaria.

Referencias

González, J., Izquierdo, M., Aguado, M.E., Varela, A.C., González, M., & Alonso, M. (2021). Using microbial metalo-aminopeptidases as targets in human infectious diseases. *Microbial Cell*, *8*(10), 239-246.

González-Balceiro, J., El Chamy, S., Méndez, Y., Pascual, I., Florent, I., Melo, P., Badu, A., Ferreira, J., Moreno, E., Carmona, A., García, D., Alonso, M., & Gazarini, M. (2017). KBE009: An antimalarial bestatin-like inhibitor of the Plasmodium falciparum M1 aminopeptidase discovered in an Ugi multicomponent reaction-derived peptidomimetic library. *Bioorganic Medicinal Chemistry*., *25*, 4628- 4636.

Análisis Cinético De La Concentración De Etanol en Geles de Interés Sanitario

Kinetic Analysis Of The Concentration Of Ethanol in Gels Of Health Interest

Prado, Daniel[1]

[1]Laboratorio de Química Analítica Aplicada, Universidad de Costa Rica, San Pedro, San José, Costa Rica

danielprado926@gmail.com

Área Temática: Química Física

Palabras clave: cinética, etanol, productos sanitarios, volatilidad, análisis químico

Debido a la pandemia causada por el SARs-CoV-2, la demanda de productos higiénicos aumentó de gran manera, entre estos los geles sanitizantes. Con este aumento en la necesidad de producir mayor cantidad de geles, nace una necesidad de mantener un buen control en la calidad de estos, uno de los factores más importantes es el porcentaje de etanol en estos geles, debido a que es el agente sanitizante.

Comúnmente el análisis de muestras con una viscosidad alta para una columna cromatográfica líquida o de gases requieren un tratamiento que suele incluir destilaciones que toman tiempo valioso del análisis, más cuando se tratan de una cantidad importante de estas. Aquí recae la importancia reducir el tiempo y costo en análisis rutinarios de aseguramiento de calidad de productos para el cuidado de la salud pública.

Siendo el etanol el producto mayoritario en estos productos, se pueden aprovechar sus propiedades fisicoquímicas como es la volatilidad para separarlo de los otros componentes del gel.

Utilizando la ecuación de Hertz-Knudsen como base de partida para el análisis se puede calcular el flujo de moléculas mediante la medición de pérdida de masa de un gel en el tiempo a una temperatura y presión constante, como se observa en la ecuación.

[1]

$$Z_w = \frac{N_A p}{\sqrt{2\pi MRT}} = \frac{p}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$$

Donde Z_w es el flujo de moléculas de gas ($m^{-2}\ s^{-1}$), α el coeficiente de adherencia, p la presión del gas en Pa, m la masa de las partículas en kg, k_B la constante de Boltzmann y T la temperatura en Kelvin, en el experimento todo se mantiene constante menos la masa, por lo cual podemos relacionar el flujo de gas con la masa en la muestra, obteniendo así la concentración de la misma.

Para realizar el experimento solo se necesita la disolución o gel a analizar y una balanza de humedad configurada a 50 °C (todas las mediciones se realizan a 50 °C para obtener una mejor resolución de la velocidad de evaporación). Se realizan mediciones primero cada minuto, apartir de los 10 minutos cada 2 hasta llegar a los 20 minutos y a partir de ahí cada 5 minutos hasta alcanzar una linealidad menor a un coeficiente de correlación de Pearson de r = 0,9995.

Aquí se propone una metodología alternativa a la cromatografía (líquida o de gases), mediante mediciones de rapidez inicial de evaporación de los geles, se pueden obtener resultados similares a la cromatografía, pero logrando reducir los costos y tiempos de análisis, así como la preparación del analista, puesto que no se requiere más que una balanza de humedad para la realización del análisis.

Referencias

Tanthapanichakoon, W.; Sim, W. J. Bioethanol Production from Cellulose and Biomass-Derived Syngas. *Engineering Journal* **2012**, *16*, 1–8. https://doi.org/10.4186/ej.2012.16.5.1.

Thermodynamics and Kinetics of Adsorption and Desorption. In *Surface Science*; John Wiley & Sons, Ltd, 2012; pp 185–228. https://doi.org/10.1002/9781119941798.ch4.

Evaluación De Un Extracto Vegetal Del Género Zanthoxylum Con Actividad Agonista LXR Como Potencial Agente Protector De La Mielina En El Modelo De Desmielinización Por Cuprizona.

Assessment Of a Plant Extract From The Zanthoxylum Genus With LXR Agonist Activity as a Potential Myelin Protective Agent in The Cuprizone Demyelination Model.

Jiménez-Correa, D.[1], Arboleda-Bustos, G.[1], Sandoval-Hernández, A.[1]

[1]Grupo de investigación en Muerte Celular, Instituto de Genética Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

dejimenezc@unal.edu.co

Área temática: Bioquímica

Palabras clave: enfermedades diesmielizantes, extracto vegetal, mielina, UHPLC-DAD, *in vitro*

Las enfermedades desmielinizantes constituyen un conjunto heterogéneo de desórdenes que afectan el sistema nervioso. Son enfermedades discapacitantes que afectan a millones de personas en todo el mundo, destacándose la esclerosis múltiple como aquella de mayor prevalencia e impacto socioeconómico. La principal característica de este grupo de patologías es la perdida y disfunción de la mielina, consecuencia de la muerte celular de las células mielinizantes, generando la necesidad de encontrar alternativas terapéuticas para la protección de este tipo celular. En este contexto, la activación farmacológica del receptor nuclear X hepático (LXR) se presenta como una alternativa promisoria, estas proteínas son factores de transcripción activados por pequeños ligandos, con funciones en la homeostasis de lípidos y asociados al proceso de mielinización en condiciones fisiológicas y patológicas.

En el presente estudio, se evaluó el potencial de reducir la desmielinización de un extracto vegetal del género Zanthoxylum con actividad agonista de LXR. El extracto se obtuvo por maceración etanólica y se caracterizó por UHPLC-DAD, identificando unos componentes mayoritarios. Para su evaluación *in vivo*, se utilizó el modelo animal de desmielinización inducida por cuprizona. La función motora de los animales se evaluó a través de la prueba comportamental de la escalera horizontal, y se llevaron a cabo análisis de tinciones histológicas y marcadores moleculares específicos para mielina, astrocitos y microglía. Se observó que en el grupo de animales con cuprizona tratados con el extracto, hubo una reducción en el estado de desmielinización en comparación con animales que no recibieron el tratamiento. Este hallazgo fue acompañado por una disminución en la activación de procesos inflamatorios mediados por astrocitos y microglía. Estos resultados sugieren que el extracto del género Zanthoxylum podría tener un efecto protector en el contexto de enfermedades desmielinizantes.

Los autores agradecen a la Vicerrectoría de Investigación de la Universidad Nacional de Colombia por la financiación de este proyecto.

Referencias

Zhen, W., Liu, A., Lu, J., Zhang, W., Tattersall, D., & Wang, J. (2017). An Alternative Cuprizone-Induced Demyelination and Remyelination Mouse Model. ASN Neuro, 9(4). https://doi.org/10.1177/1759091417725174

Péptidos Antitumorales Helicoidales Inducen La Apoptosis Especifica De Las Líneas Células Tumorales A549 y SK-MEL-23 Afectando La Transcripción De Genes Que Median La Apoptosis y Supervivencia

Helical Antitumor Peptides Induce Specific Apoptosis Of Tumor Cell lines A549 and SK-MEL-23 Affecting The Transcription Of Genes Mediating Apoptosis and Survival

Sinisterra-Tovar, D.[1,2], Urquiza, M. [1,2], Díaz-Sana, E. [1,2], Barbosa, Y.[1,2], Reyes-Triviño, N.[3], Guzmán, F.[4]

[1]Grupo de Investigación en Hormonas, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

[2]Semillero de Bioquímica, Biofísica y Biología Molecular, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

[3]Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Bogotá, Colombia

[4]Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile

dsinisterrat@unal.edu.co

Área temática: Bioquímica

Palabras clave: Péptidos antitumorales, cáncer, apoptosis, catiónicos, hélice alfa

En la base de datos de péptidos antimicrobianos (AMPs) de la Universidad de Nebraska, para 2024 hay reportados 3940 péptidos y de estos, aproximadamente 297 tienen actividad antitumoral. De hecho, se ha demostrado que algunos de estos AMPs catiónicos helicoidales inducen la apoptosis de células cancerosas. Se ha propuesto que estos péptidos pueden inducir la muerte de células de cáncer a través de diversos mecanismos, que incluyen la desestabilización, y/o destrucción de la membrana de estas, adicionalmente algunos de ellos involucrando la modulación de la expresión de genes que regulan la supervivencia de las células. Teniendo en cuenta que estos péptidos también han mostrado tener un carácter anfipático lo cual les permite interactuar con los fosfolípidos de la membrana de las células; se ha propuesto que esto puede ser debido a su interacción con la membrana cargada negativamente de las células cancerosas, similar a las bacterias, a diferencia de las células sanas que son zwitteriónicas.

En este estudio se diseñaron, sintetizaron y caracterizaron siete péptidos. Mediante dicroísmo circular se demostró que estos péptidos adoptan una estructura helicoidal. Seis de estos péptidos presentan una hélice más estable que el péptido original. Ensayos biológicos como hemolisis, y MTT evidenciaron que especialmente dos de estos péptidos afectan específicamente la viabilidad de las líneas celulares tumorales A549 (cáncer de pulmón) y SK-MEL-23 (melanoma) con un IC50 alrededor de 10 µM, sin causar hemolisis ni inducir la muerte en líneas celulares sanas (fibroblastos). Adicionalmente estudios moleculares como qPCR mostraron que estos péptidos inducen una expresión diferencial de genes antiapotóticos como BCL-2 y proapoptóticos como BAX. Estos resultados sugieren que estos péptidos catiónicos helicoidales anfipáticos son potenciales agentes antitumorales para ciertos tipos de tumores.

En conclusión, se diseñaron péptidos helicoidales anfipáticos que inducen la apoptosis especifica de las líneas tumorales A549 y SK-MEL-23 y no afectan las células sanas. Los resultados sugieren que inducen la apoptosis afectando la membrana celular y modulando la expresión de genes BAX, FAS, BCL-2, BIRC3, c-FLIP claves en la supervivencia, apoptosis y proliferación celular.

Referencias

Tornesello, A. L., Borrelli, A., Buonaguro, L., Buonaguro, F. M., & Tornesello, M. L. (2020). Antimicrobial Peptides as Anticancer Agents: Functional Properties and Biological Activities. In Molecules (Vol. 25, Issue 12). https://doi.org/10.3390/molecules25122850

Cruz, J., Flórez, J., Torres, R., Urquiza, M., Gutiérrez, J. A., Guzmán, F., & Ortiz, C. C. (2017). Antimicrobial activity of a new synthetic peptide loaded in polylactic acid or poly(lactic-co-glycolic) acid nanoparticles against Pseudomonas aeruginosa, Escherichia coli O157:H7 and methicillin resistant Staphylococcus aureus (MRSA). Nanotechnology, 28(13). https://doi.org/10.1088/1361-6528/aa5f63

Estudio De La reacción De Ciclocondensación Oxidativa De 2-formilquinolin-3-carboxilatos con 2'-aminobenzamidas Para La Síntesis De Nuevos Híbridos Moleculares De Tipo estirilquinolina-quinazolinona.

Study Of The Oxidative Cyclocondensation Reaction Of 2-formylquinoline-3-carboxylates with 2'-aminobenzamides To Synthesize Novel styrylquinoline-quinazolinone Molecular Hybrids

Diana M. Ardila[a], Diana R. Vera[a], Geraldine Álvarez[a], Alirio Palma[a],*

[a] Laboratorio de Síntesis Orgánica (LSO), Escuela de Química, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.

marielosto426@gmail.com

Área Temática: Química Orgánica

Palabras clave: Dihidroquinolino-pirrolo[1,2-*a*]quinazolinadionas, quinazolinonas, híbridos moleculares, ciclocondensación oxidativa.

El desarrollo de nuevos enfoques de síntesis para la construcción de híbridos moleculares centrados en estructuras privilegiadas como la quinolina y la quinazolinona, continúa siendo de gran interés para las químicas orgánica y medicinal (Yang et al., 2016). Enmarcado dentro de este contexto y empleando el concepto de la hibridación molecular como estrategia de síntesis y con el propósito de ampliar los alcances sintéticos de la síntesis *one-pot* de 4-estirilquinolinas desarrollada en nuestro laboratorio (Palma, A. Meléndez et al., 2020), en el presente trabajo se describe una ruta sintética *one-pot* tipo dominó para la construcción efectiva de nuevos híbridos moleculares estirilquinolina-quinazolin-4-ona **3** y dihidroquinolino[2',3':3,4]pirrolo[1,2-a]quinazolina-5,13-diona **4**.

Para abordar la síntesis de estas dos clases de híbridos moleculares, fue necesario, inicialmente, someter a los (*E*)-2-metil-4-estirilquinolin-3-carboxilatos de etilo (sintéticamente disponibles) a un proceso de oxidación con SeO_2 en 1,4-dioxano, que resultó en la formación de los intermediarios estratégicos, los (*E*)-2-formil-4-estirilquinolin-3-carboxilato de etilo **1**, los cuales, se hicieron reaccionar con las 2-amino-*N*-arilbenzamidas **2** en diferentes condiciones de reacción, que definieron el tipo de producto de ciclocondensación-oxidativa formado: los (*E*)-2-(4-oxo-3-aril-3,4-dihidroquinazolin-2-il)-4-estirilquinolin-3-carboxilato de etilo **3** o los (*E*)-6-aril-12-estiril-5*H*-14^4-quinolino[2',3':3,4]pirrolo[1,2-*a*]quinazolin-5,13(6*H*)-diona **4**. Para la optimización de las condiciones de reacción, se evaluaron factores como el catalizador, el disolvente, la temperatura y el tipo de calentamiento (convencional o por radiación de microondas); adicionalmente, todas las reacciones se llevaron a cabo en condiciones aeróbicas.

Durante el proceso de optimización se estableció que cuando la reacción se realizaba en la presencia de ácidos de Brønsted, los productos obtenidos son los híbridos fusionados **4**, mientras que, en la presencia de ácidos de Lewis, eran los híbridos quinolina-quinazolin-4-ona **3** los que se formaban. Bajo este enfoque de síntesis, se prepararon 12 híbridos moleculares (6 de cada clase **3** y **4**), para los cuales, por primera vez, se reportan sus propiedades espectroscópicas y fisicoquímicas. Todos los compuestos sintetizados fueron caracterizados por IR, HRMS y RMN.

La ruta de síntesis implementada en este trabajo, además de ser sencilla y efectiva, garantiza el acceso a híbridos moleculares no descritos hasta la fecha de las clases **3** y **4**, usando para ello material de partida económico y sintéticamente accesible.

Referencias

Palma, A., Meléndez, A., Plata, E., Rodríguez, D., Ardila, D., Guerrero, S. A., Acosta, L. M., Cobo, J., & Nogueras, M. (2020). Straightforward Synthesis of Novel 4-Styrylquinolines/4-Styrylquinolin-2-ones and 9-Styryldihydroacridin-1(2*H*)-ones from Substituted 2′-Aminochalcones. *Synthesis*, *52*(12). https://doi.org/10.1055/s-0039-1707985

Yang, L., Shi, X., Hu, B. Q., & Wang, L. X. (2016). Iodine-Catalyzed Oxidative Benzylic C-H Bond Amination of Azaarenes: Practical Synthesis of Quinazolin-4(3*H*)-ones. *Asian Journal of Organic Chemistry*, *5*(4), 494–498. https://doi.org/10.1002/ajoc.201600041

Las 2-aril-4-metilquinazolinas Como Precursores Valiosos En El Desarrollo De Nuevos Híbridos Moleculares quinazolina-quinazolin-4-ona. Síntesis, Caracterización y Predicción De Sus Propiedades Farmacocinéticas

2-aryl-4-methylquinazolines as Valuable Precursors in The Development Of Novel Molecular Hybrids quinazolina-quinazolin-4-ones. Synthesis, Characterization, and Prediction Of Their pharmaco-kinetic properties

Vera, D.[1], Álvarez, G.[1], Ardila, D.[1], Palma, A.[1]

[1]Laboratorio de Síntesis Orgánica, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Santander, Colombia.

dianave.alarcon@gmail.com

Área Temática: Química Orgánica

Palabras clave: Quinazolina, quinazolin-4-ona, ciclocondensación, híbridos moleculares.

Por separado, tanto las quinazolinas como las quinazolin-4-onas, han despertado el interés de la comunidad científica debido, a su presencia en productos naturales, en donde interactúan con múltiples dianas biológicas, lo que se traduce en un en un sinnúmero de bioactividades. La investigación y funcionalización de estos dos sistemas heterocíclicos ha conducido al descubrimiento de variedad de agentes farmacéuticos que se prescriben actualmente en tratamientos clínicos. Motivados por estos antecedentes, en este trabajo, se describe una ruta sintética de tres pasos, sencilla y efectiva para construir bibliotecas representativas de nuevos compuestos híbridos quinazolina-quinazolin-4-ona, utilizando como precursores estratégicos a las 2-aril-4-metilquinazolinas 3, sustratos, que, a su vez, son preparados mediante una metodología "*one-pot*" tricomponente a partir de la 2'-aminoacetofenona **1**.

La construcción de los nuevos híbridos moleculares 2'-aril-[2,4'-biquinazolin]-4(3H)-ona **6** se llevó a cabo a través de una ruta de síntesis de tres pasos. Según este enfoque, inicialmente, las 2-aril-4-metilquinazolinas **3** fueron preparadas mediante una reacción de ciclocondensación oxidativa "*one-pot*" de tres componentes promovida por acetato de cobre, a partir de la 2'-aminoacetofenona **1**, los aldehídos aromáticos **2** y el acetato de amonio como fuente de nitrógeno. En un segundo paso, las 2-aril-4-metilquinazolinas **3** fueron transformadas en sus correspondientes 2-arilquinazolin-4-carbaldehídos **4** por oxidación con SeO_2 en 1,4-dioxano a 100 °C. Finalmente, en el tercer paso, se llevó a cabo la condensación-ciclación intramolecular oxidativa de **4** con la antranilamida **5** en DMSO y yodo molecular, obteniéndose como productos finales los híbridos moleculares **6**.

Con esta metodología fue posible construir diez híbridos 2,4´-biquinazolínicos **6**, para los cuales, por primera vez, se reportan sus propiedades físicas y espectroscópicas. Adicionalmente, se realizó el estudio de sus propiedades *Drug-like* haciendo uso de las plataformas de libre acceso SwissADME y PreADMET. Los compuestos sintetizados **3**, **4** y **6** fueron caracterizados por las técnicas instrumentales habituales de elucidación estructural.

La metodología aquí descrita, basada en las reacciones clásicas de condensación-ciclación intramolecular oxidativa, ofrece una ruta alterna, sencilla y efectiva para acceder a nuevos híbridos moleculares del tipo quinazolina-quinazolin-4-ona **6**, a partir de reactivos comerciales y sin necesidad de usar catalizadores costosos.

Referencias

Faisal, M., & Saeed, A. (2021). Chemical insights into the synthetic chemistry of quinazolines: recent advances. Frontiers in Chemistry, 8(1), 1–24. https://doi.org/10.3389/fchem.2020.594717

Shang, X. F., Morris-Natschke, S. L., Yang, G. Z., Liu, Y. Q., Guo, X., Xu, X. S., Goto, M., Li, J. C., Zhang, J. Y., & Lee, K. H. (2018). Biologically active quinoline and quinazoline alkaloids part II. Medicinal Research Reviews, 38(5), 1614–1660. https://doi.org/10.1002/med.21492

Los autores expresan sus agradecimientos a la Vicerrectoría de Investigación y Extensión de la UIS, por la financiación de esta investigación (Proyecto No. 3918).

Desafíos y oportunidades analíticas en el estudio de los dsiruptores endocrinos en la evaluación del exposoma.

Analytical Challenges and Opportunities in the Study of Endocrine Disruptors in Exposome Assessment.

Barría, F.[1,2,3.4]

[1]Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología de la Universidad de Panamá, Ciudad de Panamá, Panamá.
[2]Centro de Información e Investigación de Medicamentos y Tóxicos, Vicerrectoría de Investigación y Postgrado de la Universidad de Panamá, Ciudad de Panamá, Panamá.
[3]Grupo de Investigación, Innovación y Desarrollo en Química Aplicada, Vicerrectoría de Investigación y Postgrado de la Universidad de Panamá, Ciudad de Panamá, Panamá.
[4]Programa de Maestría en Toxicología, Vicerrectoría de Investigación y Postgrado de la Universidad de Panamá, Ciudad de Panamá, Panamá.

Correo del presentador: felipe.barria@up.ac.pa

Palabras clave: Exposoma Humano y Metaboloma, Compuestos Disruptores Endocrinos, Espectrometría de Masas, Contaminantes Emergentes, Cromatografía

Área Temática: Química Analítica.

Esta revisión se centra en el estudio de los Disruptores Endocrinos (EDCs) y en el enorme desafío que comprende el definir una pequeña parte del exposoma químico. Las estrategias analíticas aplicadas en el contexto de exposómica han resultado ser una gran herramienta para esclarecer el papel de los EDCs en lo que a su exposición se refiere. Esta revisión ofrece una visión holística desde la perspectiva de la química analítica y de sus capacidades técnicas y verdes para la obtención de resultados valiosos (Marín-Sáez et al., 2024).

El desarrollo continuo de métodos analíticos de alto rendimiento ha permitido la cobertura simultánea del metaboloma y de compuestos químicos ambientales, No existe un técnica única capaz de abarcar completamente el espacio químico, por ende la combinación de metodologías dirigidas y no dirigidas han resultado altamente beneficiosa, constituyendo una mejoraría en la solidez de los resultados; aumentando el rendimiento analítico y reduciendo significativamente los costos y tiempos da análisis, posibilitando el estudio de grandes cohortes humanas enfocadas en la definición de los principales componentes químicos del exposoma huamano (Hyötyläinen, 2021).

El abordaje actual referente a la exposómica, ha llevado a los químicos analíticos a implementar diversas estrategias metodológicas basadas en espectrometría de masas de alta resolución aplicadas en una gran variedad de estudios actuales pero que evidencian continuante sus limitaciones.

Para el desarrollo de estas capacidades analíticas las separaciones por cromatografía líquida son las más ampliamente utilizadas, mientras que la cromatografía de gases se encuentra un tanto subutilizada debido principalmente a la complejidad de la adecuación de muestras y naturaleza química de los analitos. La selección del instrumental analítico

y las técnicas de tratamiento/adecuación de muestras son fundamentadas principalmente en los enfoques de funcionabilidad en base a costos (inversión en equipos, gastos operativos y de mantenimiento, nivel de especialización requerido, insumos) y sus posibles beneficios (mejoras en sensibilidad, cobertura, reproducibilidad, rendimiento y facilidad de uso); también se debe incluir la necesidad de inversiones tecnológicas (actualizaciones avanzadas de hardware) y las estrategias de bajo costo con alto potencial de beneficio (uso de diferentes fases de columna y para un mejor fraccionamiento de muestras).

Referencia:

Hyötyläinen, T. (2021). Analytical challenges in human exposome analysis with focus on environmental analysis combined with metabolomics. In *Journal of Separation Science* (Vol. 44, Issue 8, pp. 1769–1787). John Wiley and Sons Inc. https://doi.org/10.1002/jssc.202001263

Marín-Sáez, J., Hernández-Mesa, M., Cano-Sancho, G., & García-Campaña, A. M. (2024). Analytical challenges and opportunities in the study of endocrine disrupting chemicals within an exposomics framework. In *Talanta* (Vol. 279). Elsevier B.V. https://doi.org/10.1016/j.talanta.2024.126616

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Análisis Del Efecto Del Campo Magnético Sobre El Flujo De Agua a Través De acuaporinas TIP3;1 Mediante Dinámica Molecular en GROMACS

Analysis Of The Effect Of The Magnetic Field on Water Flow Through TIP3;1 Aquaporins using Molecular Dynamics in GROMACS

Nieto-Giraldo, D.[1,2], Torres-Osorio, J.[2], Rodas-Rodríguez, J.[1]

[1]Grupo de investigación en Magnetobiología, Universidad de Caldas, Manizales, Colombia.

[2]Grupo de investigación en Química Teórica y Bioinformática, Universidad de Caldas, Manizales, Colombia.

diego.nieto@ucaldas.edu.co

Área temática: Química teórica y computacional

Palabras clave: Germinación, magnetobiología, flujo de agua, canales de agua, magnetorrecepción, *Zea mays* L.

La magnetobiología estudia los efectos de la exposición de seres vivos a campos magnéticos diferentes al terrestre, los cuales tienen el potencial de afectar múltiples procesos fisiológicos. En particular, el grupo de investigación de magnetobiología de la Universidad de Caldas ha reportado la disminución del tiempo de germinación de semillas de diversas especies vegetales sometidas al campo magnético, además, se propuso que la influencia de esta variable sobre el flujo de agua a través de acuaporinas TIP3;1 es uno de los factores que ocasionan las alteraciones observadas en el desarrollo de las semillas. Ahora bien, para evaluar esta hipótesis mediante metodologías *in silico* inicialmente se añadió la densidad de flujo magnético (B) en el algoritmo Verlet Velocity implementado en GROMACS acorde a la propuesta de Spreiter en 1999, luego, se validó la herramienta modificada al simular sistemas control en presencia del campo magnético. Posterior a la validación, esta herramienta se utilizó para caracterizar el flujo de agua a través de un homotetrámero de TIP3;1 expuesto a B entre 0 T y 10 T y a un campo magnético fuerte con B de 100 kT. En las trayectorias de simulación se analizó el efecto del campo sobre la dinámica conformacional proteica, la frecuencia de interacciones proteína-agua, y el coeficiente de permeabilidad osmótica p_f obtenido con el modelo de difusión colectiva propuesto por Zhu en 2004. Los resultados indican que el campo influye sobre el flujo de agua, se aprecia un incremento significativo del p_f desde $1.087 \cdot 10^{-14}$ $cm^3 \cdot s^{-1}$ para el sistema control hasta $2.654 \cdot 10^{-14}$ $cm^3 \cdot s^{-1}$ bajo exposición a 100 kT, cabe resaltar que el ingreso de energía al sistema ocasiona mayor variación conformacional proteica, promueve el flujo de agua y genera una menor frecuencia de interacciones proteína-agua en esta región. Por tanto, la influencia del campo magnético sobre el flujo de agua a través de acuaporinas es un factor significativo para la obtención de los efectos observados en la germinación, aunque no es necesariamente el único proceso celular afectado. En este aspecto, la herramienta propuesta permitirá explorar otros mecanismos moleculares de magnetorrecepción en los seres vivos.

Referencias:

Spreiter, Q., & Walter, M. (1999). Classical molecular dynamics simulation with the Velocity Verlet algorithm at strong external magnetic fields. Journal of Computational Physics, 152(1), 102-119.

Zhu, F., Tajkhorshid, E., & Schulten, K. (2004). Theory and simulation of water permeation in aquaporin-1. Biophysical journal, 86(1), 50-57.

Interacciones Interfaciales Entre Nanocelulosa Bacteriana y Polihidroxibutirato: Dinámica Molecular De Sistemas Biopoliméricos Compuestos Para Aplicaciones Sostenibles

Bacterial Nanocellulose and Polyhydroxybutyrate Interfacial Interactions: Molecular Dynamics of Composite Biopolymeric Systems for Sustainable Applications

Dinais Álvarez[1,2], Marianny Y. Combariza[1], Cristian Blanco-Tirado[1], Aldo F. Combariza[2]

[1]Grupo de Investigación en Fisicoquímica Teórica y Experimental GIFTEX, Escuela de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Industrial de Santander, Santander, Colombia [2]Grupo de Investigación en Modelamiento Molecular y Simulación Computacional *in silico, Departamento* de Biología y Química, Facultad de Educación y Ciencias, Universidad de Sucre, Sucre, Colombia.

dinais2228302@correo.uis.edu.co

Área Temática: Química de Materiales.

Palabras clave: Nanocelulosa bacteriana, nanocompositos, polihidroxibutirato, dinámica molecular, bioempaques, biopolímeros

El polihidroxibutirato (PHB) es un termoplástico obtenido por fermentación bacteriana, reconocido por su alta hidrofobicidad atribuida a la tacticidad de sus unidades repetitivas y grupos metilo en su estructura molecular. Estos factores son cruciales para sus propiedades mecánicas, las cuales son comparables a las de polímeros sintéticos, destacándose por su alta cristalinidad (70% y el 80%). Sin embargo, esta misma cristalinidad también conlleva una notable fragilidad y elevada susceptibilidad a la fractura. La nanocelulosa bacteriana (NCB), modificada mediante oxidación con el radical TEMPO, se emplea como refuerzo en biopelículas termoplásticas junto con el PHB.(Aydemir, 2022) Esta NCB, en nuestro caso particular, se obtiene a partir de residuos de la industria del cacao, promoviendo así la sostenibilidad y la biodegradabilidad de los materiales resultantes.(Quintero-Silva, 2024) El presente estudio se enfoca en investigar las interacciones interfaciales entre la NCB y la matriz de PHB mediante técnicas avanzadas de Dinámica Molecular. El objetivo es analizar el impacto de la hidrofobicidad del PHB y la concentración de NCB en la adhesión de esta última a la matriz de PHB, así como evaluar el efecto sobre las propiedades mecánicas y de barrera del bionanocomposito resultante. Se diseñaron y simularon varios sistemas moleculares donde la superficie de la NCB, modificada con aminas, interactúa directamente con la superficie del PHB. Estos sistemas comprenden tres configuraciones diferentes de NCB, cada una con un número variable de cadenas de celulosa (18, 28 y 34), alterando la exposición de grupos hidroxilos en la superficie. Las simulaciones se realizaron replicando la celda unidad con simetría triclínica y parámetros de red específicos (a = 10.4 ± 0.01 Å, b = 6.717 ± 0.006 Å, c = 5.962 ± 0.007 Å; $\angle_{\alpha, \beta, \gamma}$ = 80.37 ± 0.05°, 118.08 ± 0.05°, 114.8 ± 0.05°) en el software GROMACS. Se aplica el campo de fuerza CHARMM36 para carbohidratos, seleccionado por su capacidad para describir con precisión la superficie de energía potencial de cada sistema molecular.

Este enfoque integrado permite una comprensión detallada de las dinámicas intermoleculares entre la NCB y el PHB, crucial para optimizar el diseño de biopelículas con propiedades mejoradas para aplicaciones en bioempaques y otros campos biotecnológicos avanzados.

Referencias:

Aydemir D., Gardner D. J. (2022). Biopolymer nanocomposites of polyhydroxybutyrate and cellulose nanofibrils: Effects of cellulose nanofibril loading levels. *Journal of Composite Materials,* 56 (8): 1175-1190. doi:10.1177/00219983211031654

Quintero-Silva, M.J., Suárez-Rodríguez, S.J., Gamboa-Suárez, M.A. *et al.* (2024). Polyhydroxyalkanoates Production from Cacao Fruit Liquid Residues Using a Native *Bacillus megaterium* Strain: Preliminary Study. *Journal of Polymers and the Environment*, 32 (3): 1289–1303. https://doi.org/10.1007/s10924-023-03018-2

Cinética De Inactivación De Polifenoloxidasa en Frutos *Rubus glaucus*, Tratados Con Ácido Ascórbico y Cloruro De Calcio

Kinetics Of Polyphenoloxidase Inactivation in *Rubus glaucus* Fruits, Treated With Ascorbic Acid and Calcium Chloride

Rodríguez, D[1]., Granados, J[2]

[1]Grupo de investigación GIEPRONAL. Universidad Nacional Abierta y a Distancia-UNAD, Colombia

[2]Grupo de investigación GRIPEPZ. Universidad de Cundinamarca, Colombia

dolffy.rodriguez@unad.edu.co

Área Temática: Química de Alimentos

Palabras Claves: Inhibidores enzimáticos, Constante de inactivación, tiempo reducción decimal, índice de madurez

Mora de castilla (*Rubus glaucus*) es un fruto blando, que se considera altamente perecedero teniendo una vida útil de 3-5 días, esto causa grandes pérdidas en poscosecha ; Asi mismo, el pardeamiento de la pulpa se atribuye a la acción enzimática de Peroxidasa (POD) y polifenoloxidasa (PFO), esta enzima cataliza la reacción de o-difenoles en o-quinonas mediante dos etapas: hidroxilación de monofenoles en *o*-difenoles, y oxidación de estos *o*-difenoles a o-quinonas, dicha actividad causa cambios en color, sabor, calidad de productos procesados y daños nutricionales. Esta investigación indagó comportamiento de los parámetros cinéticos de inactivación de PFO en frutos de mora de castilla, tratados con soluciones de ácido ascórbico-AA y $CaCl_2$ al 25 y 4%. PFO se extrajo según procedimiento propuesto por Chisari, *et al*, (2007), la actividad enzimática se determinó mediante técnica espectrofotométrica de Espin, J, *et al* (1996). El contenido de proteína en el extracto enzimático fue hallado con reactivo Bradford; las propiedades fisicoquímicas de los frutos se determinaron con base en lo descrito por AOAC (2017). Los datos se analizaron con base en diseño completamente al azar; Las diferencias estadísticas de promedios se evaluaron mediante análisis de varianza y prueba de comparación múltiple Duncan; La inhibición de PFO se estudió aplicando un modelo lineal mixto en programa SPSS versión 9.0. También se efectuó análisis de correlación entre las variables estudiadas, utilizando programa SAS (2018); La inactivación de POD con AA y $CaCl_2$ Se comportó como cinética de primer orden, de tal forma que la constante de inactivación (**K_i) con $CaCl_2$-**4% (0,187 $\Delta A.min^{-1}$), en el estado de madurez 5, superó significativamente ($P<0.050$) a los demás tratamientos: **AA-**2%, madurez 3 (0,021 $\Delta A.min^{-1}$), **AA-**2%, madurez 5 (0,074 $\Delta A.min^{-1}$), $CaCl_2$-4%, madurez 3 (0,099 $\Delta A.min-1$), lo cual causó una disminución significativa ($P<0.050$) en el tiempo de reducción decimal (D), incrementando la efectividad del inhibidor**.** Como mejor tratamiento en la inhibición de esta enzima se encontró la aplicación del Cloruro de Calcio en concentración del 4% ($p<0,01$) sobre frutos *Rubus glaucus* con índice de madurez 5.

Referencias

Chisari, *et al* (2007) Characterization of Polyphenol Oxidase and Peroxidase and Influence on Browning of Cold Stored Strawberry Fruit; J. Agric. Food Chem. V-55, P: 3469-3476

Adsorción De Sulfato en Sistemas Mg-Al/Carbón Activado

Sulfate Adsorption in Mg-Al/Activated Carbon Systems

Castellar-Arroyo, E.[1], Rodríguez-Ruiz, J.[2], Meza-Fuentes, E.[1]

[1]Grupo de Estudios en Materiales y Combustibles, Universidad de Cartagena, Cartagena, Colombia.

[2]Centro Para la Industria Petroquímica-SENA, Cartagena, Colombia.

emezaf@unicartagena.edu.co

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola

Palabras clave: Sulfato; hidrotalcita, cinética de adsorción.

Entre los contaminantes inorgánicos más comunes en efluentes acuosos está el ion sulfato, el cual se encuentra de manera natural en casi todos los cuerpos de agua superficiales que el ser humano utiliza para su consumo. Normalmente el ion sulfato llega a los cuerpos de agua subterráneas a través del arrastre y disolución de este desde rocas de materiales como sulfatos o yeso. La remoción de sulfato es de vital importancia debido a los problemas de salud que puede producir. En este contexto la propiedad de efecto memoria de las hidrotalcitas se puede usar para remover este anión. En este estudio se emplearon solidos obtenidos de la calcinación a 300 °C de un sistema hidrotalcita-carbón activado (Mg-Al/Carbón activado) para la remoción de sulfato de soluciones acuosas. Los sólidos fueron caracterizados por DRX, FTIR, TGA-DSC, medida del área superficial especifica por el método BET y de porosidad por el método BJH. En los materiales sin calcinar se observaron picos característicos de la fase hidrotalcita, la cual fue confirmada a través de las bandas por FTIR de los aniones carbonato presentes en este tipo de estructura. El análisis textural por los métodos BET y BJH, muestran que la mayor cantidad de HDLs se situaron en los microporos del carbón activado, lo que disminuye el área superficial específica. La remoción de sulfato en solución acuosa en los materiales alcanzo el equilibrio a los 60 minutos en la mayoría de los casos. Para las soluciones a 30 y 20 ppm, los sólidos CA-5 y CA-10 adsorbieron porcentajes superiores al 80 % del anión, mientras que en las soluciones a 40 y 50 ppm la adsorción fue superior al 70 %. El mayor porcentaje de remoción se presentó en la solución a 20 ppm en todos sólidos, siendo el material CA-5 el de mayor eficacia, con un porcentaje de remoción de 90 %. El proceso de adsorción siguió el modelo cinético de pseudo-segundo orden, y los datos de equilibrio experimental se ajustaron al modelo isotérmico de Freundlich. Los parámetros termodinámicos revelaron que la adsorción de sulfato es un proceso espontáneo a temperatura de naturaleza endotérmica.

Referencias

Castellar-Arroyo, E.; Solano-Polo, C.; Rodriguez-Ruiz, J.; Espinosa-Fuentes, E.; Meza-Fuentes, E, 2021. Structural study of the hydrotalcite-carbon composite and its use for the removal of aqueous sulphate. Desalination and Water Treatment. 213: 303-310.

Análisis De Superficies De Respuesta De La Depolimerización De PET Con Catalizadores De Ni-Zn-Al

Use Of The Response Surface Methodology For PET Depolymerization With Ni-Zn-Al Catalysts

Bautista-Berrio, W.[1], Pineda-Gómez, J.[1], Rodríguez-Ruiz, J.[2], Meza-Fuentes, E.[1]

[1]Grupo de Estudios en Materiales y Combustibles, Universidad de Cartagena, Cartagena, Colombia.

[2]Centro Para la Industria Petroquímica-SENA, Cartagena, Colombia.

emezaf@unicartagena.edu.co

Área Temática: Química de Materiales

Palabras clave: PET; RSM; depolimerización; catalizadores.

El polímero más empleado en la fabricación de envases para bebidas refrescantes y agua es el poli(tereftalato de etileno) (PET), empleado regularmente para un solo uso, generando una elevada cantidad de residuos que producen contaminación por su acumulación en diversos ecosistemas. Se espera de acuerdo con la OECD (Organization of Economic Cooperation and Development) un total de 600 Mt para el año 2060. Existen varios métodos de reciclaje de PET, siendo el reciclaje químico y el mecánico los más empleados, con el limitante de que el reciclaje mecánico no conduce a productos de interés para la industria alimenticia. El reciclaje químico a través de glicolisis produce monómeros que pueden emplearse para la nueva producción de polímeros (Franz, *et al.* 2024). En este trabajo se estudió a través de la metodología de superficies de respuesta (RSM) la depolimerización de PET-posconsumo, empleado catalizadores compuestos de $Ni_{0.37}$-$Zn_{0.37}/Al_{0.25}$, obtenidos a partir de la calcinación en atmosfera de aire a 500, 550 y 600 °C de una hidrotalcita de composición $[Ni_{0.37}Zn_{0.37}Al_{0.25}(OH)_2](CO_2)_{0.125}\cdot yH_2O$. Los experimentos fueron desarrollados en base a un diseño factorial 3^{4-1}, empleando como variables la relación propilenglicol(mL)/PET(g) (30/10, 40/10 y 50/10), la masa de catalizador (0,025, 0.05 y 0.075 g) y la temperatura de reacción (160, 170 y 180 °C). Al emplear 0.025 g de catalizador las mayores conversiones ocurrieron al usar 30 mL de propilenglicol y los catalizadores $Ni_{0.37}$-$Zn_{0.37}/Al_{0.25}$-550 y $Ni_{0.37}$-$Zn_{0.37}/Al_{0.25}$-600, mientras que al usar 0.050 g de los catalizadores la mayor conversión la presento el sólido $Ni_{0.37}$-$Zn_{0.37}/Al_{0.25}$-500 a 180 °C de temperatura de reacción y 30 mL de propilenglicol. La caracterización por FTIR de los productos de las reacciones mostró bandas características del monómero bis-hidroxipropiltereftalato (BHPT). Las superficies de respuesta de los resultados obtenidos permitieron determinar condiciones de depolimerización que fueron usadas para aumentar diez veces la cantidad de reactivos y del catalizador, obteniendo datos que se ajustan a las superficies de respuesta originadas por el uso de 0.025 g de los catalizadores. Los porcentajes de degradación en algunos casos fueron superiores al 95 %, lo que muestra que los sólidos empleados ofrecen una alternativa para el reciclaje de PET.

Referencias

Franz, A.; Buchholz, S.; Albach, R.; Schmid, R. 2024. Towards greener polymers: Trends in the German chemical industry. Green Carbon, 2: 33-44. https://doi.org/10.1016/j.greenca.2024.02.002

Exploración Del Espacio Químico De Actinobacterias Provenientes De Piscinas De Petróleo De La Amazonía Ecuatoriana

Exploration Of The Chemical Space Of Actinobacteria Isolated From Oil Ponds in The Ecuadorian Amazon

Jara, E.[1,2], Arellano, C. [1], Astorga, D.[1]

[1]Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Pontificia Universidad Católica del Ecuador, Quito, Ecuador. [2] Ciencias Biológicas Integrativas (InBioS), Centro para Ingeniería de Proteínas, Université de Liège, Lieja, Bélgica

enjara@doct.uliege.be

Área Temática: Química de productos naturales

Palabras clave: actinobacterias, cromatografía de gases, espectrometría de masas, moléculas bioactivas, minería de genoma

En la selva amazónica, las piscinas de petróleo, depósitos de crudo de baja calidad abandonados hace décadas, representan un ambiente extremadamente contaminado, con concentraciones de hidrocarburos que superan los 40,000 mg TPHs/kg. A pesar de que el manto orgánico flotante ha permitido la recolonización por plantas y microorganismos, la degradación de los hidrocarburos ha sido limitada. En este contexto, se llevó a cabo un estudio de la diversidad microbiana adaptada a estas condiciones en una piscina ubicada en Sucumbíos, Ecuador. Mediante técnicas cultivo-dependientes en el suelo de rizósfera que cubre la piscina, se obtuvieron 22 aislados bacterianos axénicos de cinco puntos muestrales. La secuenciación de los genomas completos de 20 aislados y el análisis de secuencia multilocus identificaron a 19 de ellos como actinobacterias pertenecientes a las familias: *Pseudonocardiaceae, Mycobacteriaceae, Promicromonosporaceae* y *Streptomycetaceae*, siendo esta última la más prevalente. El análisis en curso del genoma completo utilizando herramientas in-silico como Anvi'o y antiSMASH proporcionará información sobre los módulos metabólicos y los metabolitos secundarios que las diferentes especies del filo *Actinomycetota* podrían sintetizar. Adicionalmente, se empleará el análisis de redes moleculares en la plataforma GNPS (Nothias et al., 2020) basado en datos de cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS) en modo no dirigido para obtener una visualización del espacio químico de los metabolitos producidos por estas bacterias. Para esto se han obtenido extractos de los cultivos microbiológicos en medios sólidos SFM (harina de soya-manitol) y R2YE, mediante liofilización y subsecuente maceración en acetato de etilo por 24h. Los resultados obtenidos se relacionarán con los datos de minería genómica. Esta integración de datos genómicos y metabolómicos proporcionará una comprensión más completa de las capacidades metabólicas de las bacterias en este entorno extremo, así como de los posibles productos naturales útiles para el desarrollo de estrategias de biorremediación y la exploración de nuevos compuestos bioactivos con potencial para aplicaciones industriales y farmacéuticas.

Referencias:

Nothias, L., Petras, D., Schmid, R., Dührkop, K., Rainer, J. M., Sarvepalli, A., Protsyuk, I., Ernst, M., Tsugawa, H., Fleischauer, M., Aicheler, F., Aksenov, A. A., Alka, O., Allard, P., Barsch, A., Cachet, X., Caraballo-Rodríguez, A. M., Da Silva, R. R., Dang, T., . . . Dorrestein, P. C. (2020). Feature-based molecular networking in the GNPS analysis environment. *Nature Methods*, *17*(9), 905-908. https://doi.org/10.1038/s41592-020-0933-6

Estudio Computacional De La Viscosidad De Una Disolución Acuosa De Fructosa Utilizando El Modelo SPC/E Mediante Dinámica Molecular Con GROMACS

Computational Study Of The Viscosity Of an Aqueous Fructose Solution Using The SPC/E Model by Molecular Dynamics With GROMACS

Barahona, E.[1], Lezcano-González, R. E.[1,2]

[1]Escuela de Química

[2]Departamento de Química física, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Universidad de Panamá.

elvis.barahona@up.ac.pa

Área temática: Química Teórica y computacional

Viscosidad, GROMACS, B-D-fructopiranosa, modelo de agua SPC/E, simulaciones.

La viscosidad es una propiedad de transporte fundamental en el diseño y optimización de procesos que involucran el manejo de líquidos tanto en la industria alimentaria como farmacéutica. En este estudio se utiliza el programa GROMACS para predecir la viscosidad de corte en disoluciones acuosas de B-D-fructopiranosa a diferentes concentraciones y temperaturas empleando el modelo de agua SPC/E mediante dinámica molecular (MD). La B-D-fructopiranosa, una forma cíclica de la fructosa se utiliza ampliamente en la industria alimentaria por sus propiedades edulcorantes, capacidad para influir en la textura y estabilidad de los productos. Obtener la viscosidad de estas disoluciones permite optimizar procesos como el mezclado, el transporte y el almacenamiento de alimentos líquidos y semisólidos.

Para llevar a cabo las simulaciones primeramente se realizó una configuración inicial de 100 moléculas de B-D-fructopiranosa en 5500 moléculas de agua. Para la equilibración se realizaron simulaciones de 35 nanosegundos (ns) utilizando el conjunto canonico NVT (número de partículas, volumen y temperatura constante). Posteriormente, se llevaron a cabo simulaciones adicionales de 10 ns en el conjunto NPT (número de partículas, presión y temperatura constantes) para asegurar la estabilidad del sistema a la presión y temperatura de interés. Por último, se ejecutaron otras simulaciones fuera del equilibrio, cada una con una duración de 2 ns. Los pasos de integración fueron de 2 femtosegundos (fs) para asegurar una resolución temporal adecuada en las simulaciones.

Se obtuvieron resultados de la viscosidad de corte de 0.8865cP (centiPoises), comparado con el valor experimental reportado por Parimal C. (1.0544cP) esta muestra un error de alrededor de 15 % (Dey et al., 2003). Este error es consistente con el valor reportado para el cálculo de viscosidad de agua pura con el modelo SPC/E, que presenta una discrepancia del 18 % con respecto a los valores experimentales.

El modelo de agua muestra no ser el más eficiente en términos de cálculo de viscosidad, a pesar de ello, sigue siendo una primera aproximación para el cálculo de viscosidad y se requiere seguir investigando maneras de reducir la discrepancia y obtener una metodología computacional apropiada que permita medir la viscosidad.

Referencias

Dey, P. C., Motin, M. A., Biswas, T. K., & Huque, E. M. (2003). Apparent Molar Volume and Viscosity Studies on Some Carbohydrates in Solutions. Monatshefte Für Chemie, 134(6), 797-809. https://doi.org/10.1007/s00706-002-0530-7

Mark, P., & Nilsson, L. (2001). Structure and dynamics of the TIP3P, SPC, and SPC/E water models at 298 K. *Journal of Physical Chemistry A, 105*(43), 9954-9960. https://doi.org/10.1021/jp003020w

Captura Reversible De Fósforo Empleando Arcillas Funcionalizadas

Reversible Capture Of Phosphorus Using Functionalized Clays

Estrada, E.[1], Rivera, R.[1], Chanta, O[1]

[1]Grupo de Investigación en Química Aplicada, Universidad de San Carlos de Guatemala, Guatemala

erickestrada.gt@profesor.usac.edu.gt

Área Temática: Química de Materiales-

Palabras clave: Arcilla, aminoácidos, funcionalización, adsorción, contaminantes.

Se prevé que las reservas de fósforo se agotarán para el 2050 por lo que es indispensable trabajar desde ya en métodos que garanticen la recuperación y reutilización. Por otro lado, es necesario eliminar el fósforo de cuerpos de agua para reducir su contaminación. La idea es: emplear arcillas modificadas para la captura y posterior liberación del fosforo (biofertilizante).

Se funcionalizaron las arcillas caolinita y montmorillonita con aminoácidos (Lisina, Histidina y Glicina). Las arcillas modificadas fueron sometidas al proceso de adsorción de fósforo. Se evaluó la reversibilidad de la captura de fósforo y se cuantificó la cantidad de fósforo liberado en esas condiciones.

Se confirmó la correcta funcionalización de 6 arcillas y su saturación con fosforo se evalúo mediante espectrometría UV-VIS y microscopía; uso del método vanadato molibdato para cuantificar P, pruebas de absorción desorción de fósforo, métodos de caracterización análisis termogravimétrico (TGA) y difracción de rayos X. Se usaron (Montmorillonita y caolinita) y 3 aminoácidos (lisina, histidina y glicina), se lograron sintetizar 12 nanomateriales que fueron capaces de capturar iones fosfato de manera reversible.

Las organoarcillas obtenidas fueron sometidas a ciclos de adsorción/desorción, y la cantidad de fosforo retenido y liberado se cuantifico con la curva de calibración. El análisis termogravimétricos y la difracción de rayos X de polvo evidenciaron los cambios químicos ocurridos los cuales se traducen en variaciones energéticas en los nanomateriales.

Se determinó la combinación ideal de aminoácido y arcilla funcionalizada que absorbieron la mayor cantidad de fósforo con estimación del grado de reversibilidad. Caracterizamos las arcillas modificadas, y logramos conocer su grado de modificación.

Referencias

Benetoli, L. O. B., de Souza, C. M. D., da Silva, K. L., de Souza, I. G., de Santana, H., Paesano, A., da Costa, A. C. S., Zaia, C. T. B. V., & Zaia, D. A. M. (2007). Amino Acid Interaction with and Adsorption on Clays: FT-IR and Mössbauer Spectroscopy and X-ray Diffractometry Investigations. *Origins of Life and Evolution of Biospheres*, *37*(6), 479-493. doi.org/10.1007/s11084-007-9072-7

Unuabonah, E. I., Agunbiade, F. O., Alfred, M. O., Adewumi, T. A., Okoli, C. P., Omorogie, M. O., Akanbi, M. O., Ofomaja, A. E., &Taubert, A. (2017). Facile synthesis of new amino- functionalized agrogenic hybrid composite clay adsorbents for phosphate capture and recovery from water. *Journal of Cleaner Production*, 164, 652-663. doi.org/10.1016/j.jclepro.2017.06.160

Metaabolic Profiling-Assisted Identification Of Antifungal Azadirone-Type Limonoids From *Azadirachta indica* Leaves

Identificación Asistida por Perfilado Metabólico de Limonoides Antifúngicos Tipo Azadirona De Hojas De *Azadirachta indica*

Ericsson Coy-Barrera[1]

[1]Bioorganic Chemistry Laboratory, Facultad de Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Militar Nueva Granada, Cajicá 250247, Colombia

inquibio@unimilitar.edu.co

Área Temática: Química de productos naturales y farmacéuticos

Keywords: Targeted Metabolomics, Supervised Analysis, Limonoids, *Fusarium oxysporum*

Phytopathogenic fungi are responsible for significant agricultural losses worldwide, necessitating the development of novel antifungal agents (Brauer et al., 2019). *Azadirachta indica*, commonly known as neem, has long been recognized for its broad spectrum of bioactive compounds, especially with antimicrobial potential (Wylie et al., 2022). This study focuses on the isolation and identification of limonoid compounds from the ethanolic extract of neem leaves, aiming to discover potential antifungal agents against key phytopathogens.

Fresh leaves of *A. indica* were collected from different location along Colombian Caribbean Coast and subjected to ethanolic extraction. The extracts were analyzed using Liquid Chromatography-Mass Spectrometry (LC-MS) to identify potential bioactive compounds. Phytopathogenic fungal strain of *Fusarium oxysporum* was obtained from our in-house collection for antifungal assays. The ethanolic extract of *A. indica* leaves underwent metabolic profiling using LC-MS. Supervised analysis, specifically Partial Least Squares Discriminant Analysis (PLS-DA), was employed to target and identify bioactive compounds. Scores and S-Plots from single-Y PLS-DA were used to pinpoint limonoid structures. Biochromatograms were generated to correlate metabolite presence with antifungal activity. Identified compounds were isolated and their inhibitory concentrations (IC_{50}) against fungal pathogens were determined using standard *in vitro* assays.

Metabolic profiling and PLS-DA analysis led to the identification of five azadirone-type limonoids (**1-5**) from the ethanolic extract. These compounds exhibited significant antifungal activity, with IC_{50} values below 10 μM against the tested phytopathogenic fungi. The biochromatogram analysis confirmed a strong correlation between the presence of these limonoids and antifungal activity. The discovery of azadirone-type limonoids as potent antifungal agents highlights the potential of *A. indica* as a source of novel phytochemicals. The use of LC-MS coupled with PLS-DA allowed for the efficient identification of bioactive compounds, demonstrating the efficacy of targeted metabolic profiling in natural product research. These findings could lead to the development of new antifungal treatments that are both effective and environmentally friendly. Future research should explore the mechanistic pathways of these limonoids and their potential applications in agricultural disease management. *The present study is a product derived from the project EXT-CIAS-3854 financed by Vicerrectoria de Investigaciones at UMNG, validity 2023.*

References

Brauer VS, Rezende CP, Pessoni AM, De Paula RG, Rangappa KS, Nayaka SC, Gupta VK, Almeida F. (2019). Antifungal Agents in Agriculture: Friends and Foes of Public Health. *Biomolecules*, *9*, 521.

Wylie MR, Merrell DS. (2022). The Antimicrobial Potential of the Neem Tree *Azadirachta indica*. *Frontiers in Pharmacology*, *13*, 891535.

Implementación Del Modelo Tpack Para La Enseñanza De La Química A Nivel De Educación Media y Su Influencia En El Rendimiento Académico

Implementation Of The Tpack Model For The Teaching Of Chemistry At The Middle Education Level and Its Influence on Academic Performance

Erik Gavidia[1]

Licenciatura en Docencia de Química, Escuela de Química, Universidad de Panamá.

proferikgael@gmail.com

Área Temática: Educación Química

Palabras clave: Tecnologías de la Informática y la Comunicación (TIC), Modelo TPACK (Conocimiento Técnico Pedagógico del Contenido), motivación estudiantil, alcance estudiantil de la metodología, rendimiento académico, enseñanza de la Química.

El Modelo TPACK (Conocimiento Tecnológico Pedagógico del Contenido) ha emergido como una estrategia innovadora en la enseñanza, integrando conocimientos tecnológicos, pedagógicos y de contenido para mejorar el proceso de aprendizaje. En este estudio, se investiga la implementación del modelo TPACK en la enseñanza de la Química a nivel de Educación Media en Panamá, con el objetivo de analizar su influencia en el rendimiento académico y la motivación estudiantil.

La investigación es de naturaleza comparativa, ya que se trabaja con dos grupos: un grupo experimental, donde se aplicó el modelo TPACK, y un grupo de control, donde se utilizó una metodología tradicional. El estudio también es exploratorio, debido a que esta es la primera investigación que se realiza en Panamá sobre este tema. Además, es correlacional porque establece una correspondencia lógica entre la variable independiente (Metodología de enseñanza) y las dependientes (rendimiento académico y motivación estudiantil). Se implementaron diversas fases metodológicas, incluyendo la planificación del modelo, diseño de actividades y pruebas evaluativas, ejecución de la metodología y análisis de resultados.

Los resultados revelaron que el grupo experimental, bajo la metodología TPACK, mostró un rendimiento académico y motivación estudiantil superiores al grupo de control. Se observó un mayor promedio de calificaciones y un mayor porcentaje de alcance estudiantil en el grupo experimental, especialmente en los temas de "Estado Líquido" y "Disoluciones". la importancia de la presencialidad en el aprendizaje de la Química, destacando el impacto negativo del entorno de aprendizaje virtual en el rendimiento académico. Se resaltó la eficacia de la metodología TPACK en la mejora del proceso de enseñanza-aprendizaje, obteniendo así un alcance estudiantil de la metodología del 68.2% en el grupo experimental, al proporcionar un entorno dinámico y participativo que facilita la comprensión de conceptos complejos.

La implementación del modelo TPACK en la enseñanza de la Química demostró tener un impacto positivo en el rendimiento académico y la motivación estudiantil. En contraste, la metodología tradicional al ser unidireccional, más deductiva y pasiva no estimuló adecuadamente a los estudiantes para activar sus recursos metacognitivos y ser conscientes de su conocimiento, por lo que se insta a los docentes a considerar enfoques pedagógicos innovadores que utilicen las tecnologías del aprendizaje y el conocimiento (TAC) para mejorar el aprendizaje de la Química.

Referencias

Becerril Morales, F., & Mendoza González, B. (2022). TPACK: innovación en la enseñanza de química durante la pandemia covid-19 en alumnado de bachillerato. *Apertura (Guadalajara, Jal.),* 14(1), 26-51.

Delletesse, M. et al. (2019). La metodología TPACK en el nivel universitario: Su implementación en la secuencia didáctica de gases. *Revista Educación en la Química*. Vol. 25 , N°1, pp 5-14.

Propiedades fotocatalíticas mejoradas de sistemas acoplados AgBr/SnO2 bajo luz UV y visible

Enhanced UV and visible light photocatalytic properties of synthesized AgBr/SnO_2 composites

Puga, F.[1], Navío, J.A.[2], Hidalgo, M.C.[2]

[1]Instituto de Ciencias Agroalimentarias, Animales y Ambientales (ICA3), Universidad de O´Higgins, San Fernando, Chile

[2]Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla (ICMS), Centro Mixto Universidad de Sevilla-CSIC, Sevilla, España

felipe.puga@uoh.cl

Área Temática: Química Inorgánica

Palabras clave: dióxido de estaño, bromuro de plata, fotocatálisis, colorantes, ácido cafeico

En el escenario de los materiales para fotocatálisis heterogénea, el SnO_2 ha sido objeto de numerosos trabajos de investigación (Al-Hamdi et al., 2017). Sin embargo, su alta energía de banda prohibida (3,6 eV) limita su uso directo en aplicaciones solares (Karthikeyan et al., 2020). El objetivo de este trabajo fue sintetizar fotocatalizadores AgBr/SnO_2 con diferentes porcentajes molares de SnO_2, con el fin de explorar sus características como materiales para fotocatálisis heterogénea.

Los reactivos $SnCl_4$*$5H_2O$ (Sigma), rodamina B (Merck) y ácido cafeico (Sigma) se usaron tal como fueron recibidos. Para la síntesis de SnO_2 se usó un reactor-digestor Parr Instruments para alta presión. El SnO_2 fue sintetizado mediante un proceso hidrotermal, mientras los sistemas acoplados (AgBr/SnO_2) fueron preparados por un procedimiento de precipitación-depositación de AgBr sobre una suspensión acuosa de SnO_2 previamente sintetizado. Las muestras fueron caracterizadas por difracción de rayos X (DRX), fisisorción de N_2, microscopia electrónica de barrido (SEM) y transmisión (TEM), entre otras. Se evaluó la actividad fotocatalítica de los fotocatalizadores preparados a través de la degradación fotocatalítica de rodamina B (RhB) y ácido cafeico (AC) bajo iluminación UV y visible.

La energía de banda prohibida de los materiales acoplados resultó ser similar al AgBr individual, indicando que estos sistemas compuestos son sensibles a la luz visible. En los estudios de degradación fotocatalítica, para ambos sustratos, se encontraron velocidades de conversión de alrededor del 95% en 45 minutos con iluminación UV, y del 85% bajo iluminación visible. Estas velocidades de conversión fueron superiores a las velocidades de los componentes puros AgBr y SnO_2, en las mismas condiciones experimentales.

Las mejoras en las propiedades fotocatalítica de los compuestos AgBr/SnO_2 se atribuyeron, en parte, a un aumento sinérgico en la viabilidad de la adsorción, así como a la separación efectiva de los portadores de carga fotoinducidos, que resultan de la formación de una heterounión tipo II.

El acoplamiento de AgBr con SnO_2 mejora notablemente la actividad fotocatalítica, tanto bajo iluminación UV como visible, con respecto a los componentes puros. Estas características abren el camino a futuras aplicaciones de este material en el campo de la remediación ambiental.

Referencias

Al-Hamdi, A. M., Rinner, U., & Sillanpää, M. (2017). Tin dioxide as a photocatalyst for water treatment: A review. In *Process Safety and Environmental Protection* (Vol. 107, pp. 190–205). Institution of Chemical Engineers. https://doi.org/10.1016/j.psep.2017.01.022

Karthikeyan, C., Arunachalam, P., Ramachandran, K., Al-Mayouf, A. M., & Karuppuchamy, S. (2020). Recent advances in semiconductor metal oxides with enhanced methods for solar photocatalytic applications. In *Journal of Alloys and Compounds* (Vol. 828). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.154281

Síntesis *one-pot* Tipo Dominó De (*E*)-2-aril-4-estirilquinazolinas A Partir De La 2'-aminoacetofenona

***One-pot* Domino Type Synthesis Of (*E*)-2-aryl-4-styrylquinazoline From 2'-aminoacetophenone**

Alvarez, G.[1], Vera, D.[1], Ardila, D.[1], Palma, A.

[1]Laboratorio de Síntesis Orgánica, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.

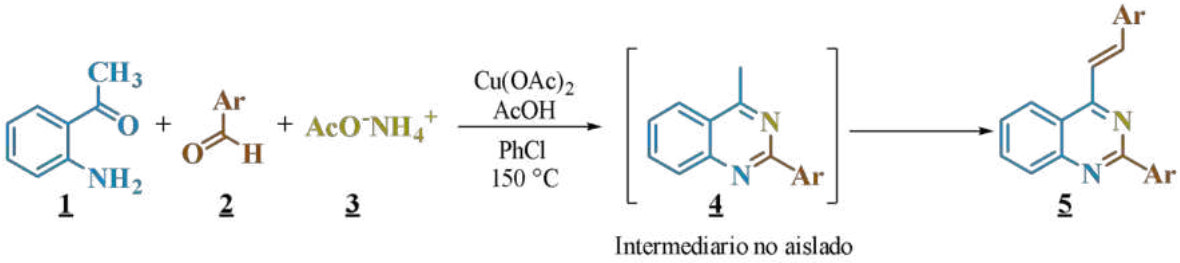
geraldine_1799@hotmail.com

Área Temática: Química Orgánica

Palabras claves: Quinazolina, estirilquinazolina, condensación tricomponente.

Los derivados de la quinazolina, en especial aquellos que contienen el apéndice estirilo, son una subclase de compuestos heterocíclicos nitrogenados que forman parte constitutiva de múltiples moléculas con una amplia variedad de actividades biológicas (Jampilek et al., 2009). Incentivados por el potencial biológico de este sistema heterocíclico, la derivatización del anillo de la quinazolina ha sido extensamente descrita en la literatura a través de metodologías que requieren múltiples pasos de síntesis para la prefuncionalización de los materiales de partida, además del empleo de catalizadores de complejos metálicos. Tomando estos aspectos en consideración, a continuación, en este trabajo se describe una metodología alterna y efectiva para llevar a cabo la construcción directa de 2-aril-4-estirilquinazolinas a partir de la 2'-aminoacetofenona.

La síntesis *one-pot* tipo dominó de las (*E*)-2-aril-4-estirilquinazolinas **5** se realizó mediante un proceso de ciclocondensación oxidativa de tres componentes: la 2'-aminoacetofenona **1**, los aldehídos aromáticos **2** (en exceso) y el acetato de amonio **3** como fuente de nitrógeno, promovida por el acetato de cobre en clorobenceno y cantidades catalíticas de ácido acético. En estas condiciones de reacción, tiene lugar la formación inicial de los productos de ciclocondensación oxidativa, las 2-aril-4-metilquinazolines **4**, mismas que, *in situ,* sufren una reacción de alquenilación del grupo metilo tipo *Knoevenagel* con el exceso de aldehído presente en la mezcla de reacción, y se transforman en las correspondientes (*E*)-2-aril-4-estirilquinazolinas **5**.



Esquema 1. Síntesis de las (*E*)-2-aril-4-estirilquinazolinas **5**.

Haciendo uso de esta metodología, se prepararon 10 ejemplos de quinazolinas **5**, las cuales fueron caracterizadas por las técnicas instrumentales habituales de elucidación estructural. Para la mayoría de esos compuestos se describen, por primera vez, sus propiedades fisicoquímicas y espectroscópicas. Adicionalmente, se diagnosticaron las propiedades *drug-like* de todos los compuestos sintetizados haciendo uso de las plataformas de libre acceso SwissADME y preADMET, y se propició el estudio de su actividad anticancerígena en el Instituto Nacional del Cáncer de los Estados Unidos (NCI).

La metodología aquí descrita representa una alternativa eficiente y muy sencilla para llevar a cabo la síntesis directa de nuevas 2-aril-4-estirilquinazolinas en un proceso dominó, sin la necesidad de aislar intermediaros, a partir de la 2'-aminoacetofenona **1** comercial.

Referencias

Jampilek, J., Musiol, R., Finster, J., Pesko, M., Carroll, J., Kralova, K., Vejsova, M., O'Mahony, J., Coffey, A., Dohnal, J., & Polanski, J. (2009). Investigating Biological Activity Spectrum for Novel Styrylquinazoline Analogues. *Molecules*, *14*(10), 4246–4265. https://doi.org/10.3390/molecules14104246

Satish, G., Polu, A., Kota, L., & Ilangovan, A. (2019). Copper-catalyzed oxidative amination of methanol to access quinazolines. *Organic & Biomolecular Chemistry*, *17*(19), 4774–4782. https://doi.org/10.1039/C9OB00392D

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Electroquímica De Óxidos De Hierro Tipo Ferritas y Perovskitas Para Aplicaciones Tecnológicas

Electrochemistry Of Iron Oxides: Ferrites and Perovskites For Technological Applications

Caballero-Manrique, G. [1,2], Denver, M. [3], Alí, M. [3] Jaén, J. [1,2]

[1]Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Universidad de Panamá. Panamá.

[2]Grupo de Investigación de Materiales (GIM), Universidad de Panamá, Panamá.

[3]Escuela de Química, Universidad de Panamá, Panamá.

griselda.caballero@up.ac.pa

Área Temática: Química Física

Palabras claves: ferritas de cobre, perovskitas de lantano, voltamperometría cíclica.

Se investigan los óxidos de metales de transición como los de tipo perovskitas y ferritas por sus propiedades físicas y químicas especiales. La estructura general de ferritas es MFe_2O_4 en donde M representa un ion metálico divalente. Las de Cu^{2+} se presentan como $CuFe_2O_4$. La estructura cristalina de perovskita es similar al titanato de calcio ($CaTiO_3$), con fórmula general ABX_3, donde "A" y "B" son dos cationes de tamaños muy diferentes y "X" es un anión unido a ambos. Sintetizados en escala nanométrica permiten su aplicación en catálisis heterogénea, degradación de contaminantes, almacenamiento de energía, ánodo en baterías, entre otros (Pei, et al., 2005). Las perovskitas de lantano ($LaFeO_3$) podrían utilizarse como ánodos económicos en electrólisis de agua alcalina mejorando sus características superficiales (Jain et al., 1995).

Esta investigación desarrolla la síntesis de nanopartículas (NP) de $CuFe_2O_4$ mediante técnicas de estado sólido asistidas por un procedimiento de molienda de bolas de baja energía, a partir de mezclas estequiométricas de polvos de CuO y hematita (α-Fe_2O_3) y de perovskitas de lantano mediante una síntesis verde usando ácido tánico. La caracterización electroquímica se realizó por voltamperometría cíclica, cronoamperometría e impedancia electroquímica en diferentes electrolitos: HCl, H_2SO_4, KOH y KCl. La caracterización estructural mediante difracción de Rayos X (DRX) y Microscopía electrónica de barrido (SEM). En las ferritas de cobre se confirmó por DRX predominancia de estructura tetragonal y la estructura predominante de perovskita de lantano. En FESEM se observó la ocurrencia de una distribución de las partículas de aglomeración de granos irregulares consistente en cristalitos finos de forma esférica. Se obtuvo una sola cupro-espinela ($CuFe_2O_4$). La caracterización electroquímica se realizó teniendo como electrodo de trabajo (WE) a los óxidos en una pasta de carbón (CPE) por método de inmovilización de micropartículas. En medio básico y neutro estos materiales exhibieron comportamiento capacitivo, tipo condensador, mientras que en medio ácido presentaron picos catódicos y anódicos a potenciales característicos de estados de oxidación de cationes Fe, Cu y La. Se discute detalladamente la potencial aplicación de estos materiales, como material de electrodo para celdas de combustible de alcohol directo o baterías.

Referencias

Jain, A. N., Tiwari, S. K., Singh, R., & Chartier, P. (1995). Low-temperature synthesis of perovskite-type oxides of lanthanum and cobalt and their electrocatalytic properties for oxygen evolution in alkaline solutions. *Journal of the Chemical Society, FaradayTransactions, 91*(12), 1871. https://doi.org/10.1039/ft9959101871

Pei, Y., Li, Y., Yinghui, J., Shen, W., Wang, Y., Yang, S., & Han, S. (2015). Study on the high-temperature electrochemical performance of perovskite-type oxide $LaFeO_3$ with carbon modification. *International Journal of Hydrogen Energy*, *40*(28), 8742-8749.

https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.05.047

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Análisis Quimiométrico De Mieles Colombianas Mediante Conductividad Eléctrica, Color, Actividad De Agua, Densidad Optica Cenizas y Poder Rotatorio

Chemometric Analisys Of Colombian Honeys Using Electrical Conductivity Color Water Activity Ash Optical Density and Rotatory Power

Salamanca, G. G.[1,2*] Osorio Tangarife. M.[1] Tapiero Cuellar, J.L.[3]

[1]Laboratorio de Investigaciones en Propiedades fisicoquímicas de Alimentos. [2]Departamento de Química. Facultad de Ciencias Universidad del Tolima. Universidad del Tolima, 730006 Ibagué, Tolima, Colombia. [3]Grupo de Investigaciones Agroindustriales GICTACAB. Centro Agropecuario Buga. Servicio Nacional de Aprendizaje SENA, Regional Valle, Colombia.

gsalaman@ut.edu.co

Área Temática: Química de los alimentos.

Palabras clave: Análisis Multivariado. Métodos analíticos. Mieles colombianas.

La miel es un producto natural elaborado por las abejas a partir de nectarios de plantas florales y extraflorales o de excreciones de insectos chupadores, que las abejas recolectan, transforman y combinan con sustancias específicas y maduran en el interior del panal. Es una fuente de azúcares fácilmente disponibles, ácidos orgánicos, aminoácidos, macro y micronutrientes y sustancias biológicamente activas. Se han evaluado las propiedades fisicoquímicas de 85 muestras de mieles de mielada, florales y uniflorales colombianas. En la evaluación de parámetros se consideraron los criterios de repetibilidad, reproducibilidad y exactitud de las mediciones según los métodos armonizados de la comisión internacional de la miel (IHC). Las valoraciones de las diferentes mieles se realizaron haciendo uso de técnicas de análisis multivariado sobre los parámetros de color (Pfund y CIELab), densidad óptica, conductividad eléctrica, cenizas de actividad de agua y el parámetro del poder rotatorio, usando el software JMP. La clasificación de color USDA para la miel colombiana según la escala Pfund y la densidad óptica revelaron mieles de diferentes tonalidades de color: ámbar extra claro (35-50 mm; 0,595), ámbar claro (51-85 mm; 1,389), ámbar (86-114 mm; 3,00), ámbar oscuro (> 114 mm). Los parámetros CIELab, conductividad eléctrica y actividad del agua, muestran importancia en la clasificación de la miel según el análisis quimiométrico. La conductividad eléctrica medida fue de 0,164 a 1,513 mS cm^{-1}; la actividad del agua (0,560 y 0,658), las cenizas 0,526 y 0,789%. El poder rotatorio específico muestra un solapamiento entre los diferentes tipos de miel según su origen biogeográfico -20,8 a - 38,2 en zona de bosque húmedo, - 7,60 a 51,0 bosque seco tropical, según su origen botánico. Cada carbohidrato tiene un ángulo específico de rotación de la luz polarizada. Las mieles florales y las mieles de mielada tienen la propiedad de rotar el plano de polarización de la luz polarizada y esta propiedad depende en gran medida de los azúcares de la miel (sus tipos y proporción relativa). El poder rotatorio resulta significativo en procesos de discriminación al permitir identificar mieles florales y mielatos y diferenciar mieles en función de su origen biogeográfico

Referencias

Pucarea, C., Teudesdea, A., Chis, A. M. (2016).Chemometric Analysis of Selected Honey Samples from Western Part of Romania. Revista de Chimie 67(11):2129-2133

Tarapoulozini, M., Mironescu, M., Agriopoulou, S. (2023). Insight into the Recent Application of Chemometrics in Quality Analysis and Characterization of Bee Honey during Processing and Storage. Foods 12(3):473.

Respuesta Molecular Del Clavel (*Dianthus Caryophyllus* L.) Asociada A La Inducción De Resistencia Sistémica Adquirida Tras La Aplicación Foliar De Tiamina Durante El Marchitamiento Vascular Causado Por *Fusarium* Oxysporum F. Sp. *Dianthi*.

Molecular Response Of Carnation (*Dianthus Caryophyllus* L.) Associated With The Induction Of Acquired Systemic Resistance After The Foliar Application Of Thiamine During Vascular Wilting Caused By *Fusarium Oxysporum* F. Sp. D*ianthi*.

Esquivel JM 1,2, Melgarejo LM 2, Ardila HD 1, Perez WH 1,2.

[1]Grupo de investigación Actividades Metabólicas Vegetales, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

[2]Grupo de investigación Fisiología del estrés y biodiversidad en plantas y microorganismos, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

hdardilab@unal.edu.co

Área Temática: Bioquímica

Palabras clave: Tiamina, Elicitor, Priming, SAR.

Actualmente la búsqueda de alternativas al manejo de problemas fitosanitarios presentes en cultivos de importancia económica, están enfocados a la investigación y desarrollo de manejos sostenibles de baja toxicidad para el ambiente y los agricultores. Este es el caso del marchitamiento vascular en el clavel (*Dianthus caryophyllus* L.) causado por *Fusarium oxysporum* f. sp. *dianthi*, en donde la aplicación de inductores de resistencia se ha propuesto como una posible alternativa limpia para el control de la enfermedad. En la presente investigación se estudió el efecto que tiene la aplicación de un inductor de resistencia de origen biótico como la tiamina, en los niveles transcripcionales de algunas proteínas que han sido asociadas con la inducción de resistencia sistémica adquirida ó RSA. Para ello, mediante un ensayo *in vivo* en condiciones de invernadero, se emplearon dos variedades de clavel con diferentes niveles de resistencia a dicho fitopatógeno y se realizó aplicación foliar de 3mL de tiamina a una concentración de 1mM a lo largo de 5 días. Además de determinar el efecto en la incidencia de la enfermedad, se determinaron los niveles transcripcionales mediante RT-qPCR de genes como NPR1, Cisteín proteasa y proteínas de dominio 14-3-3 asociados a mecanismos moleculares de resistencia descritos por estudios proteómicos usando HPLC-orbitrap previos de (Perez Walter et al. 2022). Durante 8 semanas de seguimiento a la enfermedad, se encontró que el tratamiento con tiamina efectivamente disminuye la progresión de la enfermedad en la variedad susceptible asociado posiblemente a un aumento de la expresión de genes involucrados en la inducción de RSA. Dados los resultados se hace pertinente el estudio en campo abierto para evaluar el comportamiento de la tiamina directamente sobre los cultivos de interés comercial que corroboren la innovación y aplicación de esta tecnología.

Referencias

Pérez Mora W, Melgarejo LM, Ardila HD. Effectiveness of some resistance inducers for controlling carnation vascular wilting caused by Fusarium oxysporum f. sp. dianthi. https://doi.org/101080/0323540820201868734 [Internet]. 2021 [cited 2023 May 6];54(13–14):886–902. Available from: https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/03235408.2020.1868734

Efecto De La Concentración De Un Espumante y Eticulante Férrico en La Estructura De Un Criogel De Pectina Diseñado Como Matriz Alimentaria

Effect Of The Concentration Of a Foaming Agent and Ferric Cross-Linker on The Structure Of a Pectin Cryogel Designed As a Food Matrix

Portugal, H.[1], **Miranda, L.**[1]

[1]Universidad Nacional de San Agustín de Arequipa, Arequipa, Perú.

hportugal@unsa.edu.pe

Área Temática: Química de Alimentos

Palabras clave: criogel, matriz alimentaria, pectina, hierro, espumante

Los criogeles de calidad alimentaria son una opción interesante de matriz portadora para ingredientes funcionales, ya que pueden proteger los micronutrientes, los aceites saludables y los compuestos bioactivos de la degradación. Así mismo, su composición y estructura interna mejoran la biodisponibilidad de los compuestos contenidos en ellos y controlan su liberación.

En la experimentación se prepararon diluciones homogéneas a 60 °C que contenían pectina (LA-S20S de Aglupectin) y agentes reticulantes de hierro ($FeSO_4.H_2O$) y calcio ($CaCl_2$) a diferentes concentraciones y estandarizado a un pH de 4. Estas soluciones formadoras fueron analizadas mediante pruebas dinámicas en un reómetro para evaluar las interacciones entre el hidrogel y el agente reticulante. Posteriormente, los hidrogeles se mezclaron con un agente espumante ($NaHCO_3$) y fueron liofilizados a -50 °C para formar los criogeles. Dichos criogeles (obtenidos con y sin espumante) fueron evaluados mediante microscopía óptica para determinar la distribución de poros.

En la evaluación reológica, las soluciones con mayor concentración de hierro mostraron un módulo elástico mayor al del biopolímero, sin embargo, no lograron superar la elasticidad de las formulaciones reticuladas con calcio. Por otro lado, el criogel obtenido por liofilización presentó una mayor cantidad de poros cuando se utilizó un agente espumante. Asimismo, la reacción del hidrogel reticulado con el agente espumante generó una distribución homogénea de los componentes de manera que la liberación de hierro se desarrollaría con mayor facilidad.

En conclusión, los criogeles de pectina reticulados con metales bivalentes y modificados con un espumante son aptos para ser usados como matriz alimentaria que transporte hierro debido a que existe reactividad en la pectina y generación de interacciones intermoleculares entre este biopolímero y el agente reticulante.

Referencias

Selvasekaran, P., & Chidambaram, R. (2021). Food-grade aerogels obtained from polysaccharides, proteins, and seed mucilages: Role as a carrier matrix of functional food ingredients. *Trends in Food Science & Technology*, 112, 455-470.

Pantic, M., Horvat, G., Knez, Z., & Novak, Z. (2020). Preparation and Characterization of Chitosan-Coated Pectin Aerogels: Curcumin Case Study. *Molecules*, 25(5).

Síntesis De Ésteres Biliares De Cadena Corta. Explorando Su Potencial Como Agentes Gelificantes

Short-chain Bile Acid Esters: Exploring Their Potential As Gelling Agents

García-Méndez, J.[1], Fernández-Herrera, M. A.[1]

[1]Laboratorio de Biomoléculas y Biomateriales, Cinvestav-Mérida, Mérida, México.

jair.garcia@cinvestav.mx

Área Temática: Química Orgánica.

Palabras clave: Éster, Biliares, Microondas, Geles.

Los ácidos biliares son una serie de compuestos esteroidales atractivos debido a su intrínseca actividad biológica, poseen un esqueleto rígido y estereoquímica bien definida, presentan además comportamiento anfifílico y autoensamblaje. Los ésteres biliares muestran propiedades como organogelantes, compositos dentales, transportadores de fármacos o como bloques para ensambles supramoleculares.

Para el presente trabajo se emplearon los siguientes equipos para llevar a cabo la síntesis y caracterización de los compuestos obtenidos: microondas, rotavapor, resonancia magnética nuclear (RMN), espectroscopía infrarroja (FTIR), baño ultrasónico, microscopia electrónica de barrido (SEM), difractómetro de rayos X (DRX)

Los ésteres se sintetizaron directamente, mezclando el respectivo alcohol (metanol, etanol, isopropanol o 1-butanol) con AcOCl, a temperatura ambiente, posteriormente se añadió a la mezcla el ácido biliar correspondiente (ácido cólico, desoxicólico o litocólico) y la reacción se realizó mediante calentamiento en microondas. Obtenidos los esteres, se llevaron a cabo estudios de su potencial gelificante, para lo que se colocaron estos en diversas concentraciones y disolventes (alifáticos y aromáticos, mezclas con agua) bajo sonicación. Los ésteres y geles obtenidos fueron caracterizados por diversas técnicas espectroscópicas y fisicoquímicas.

La síntesis asistida por microondas permitió disminuir los tiempos de reacción a un par de minutos, se disminuyeron la cantidad de reactivos empleados, se incrementaron los rendimientos y la selectividad de la reacción. Los metil- y etil-ésteres fueron los compuestos que presentaron actividad gelificante para los tres bases biliares; los geles obtenidos se formaron en diversos medios como el *p*-xileno, para el colato de metilo; hexano, para el desoxicolato- y litocolato de etilo, así como diversas mezclas en sistemas agua/disolvente.

La esterificación de ácidos biliares se optimizó de forma sustancial, permitiendo orientar estos procesos hacia metodologías más verdes, efectivas y selectivas. Los ésteres biliares presentaron la capacidad de auto ensamblarse supramolecularmente mediante interacciones anfifílica con el disolvente, generando redes que conforman el gel; la naturaleza y orientación de las moléculas del éster y disolvente influye en la gelificación.

Mediante el calentamiento por microondas se optimizó la reacción de esterificación de ácidos biliares; a partir de los metil- y etil-ésteres se obtuvieron diversos geles. Los ésteres y geles se caracterizaron óptimamente.

Referencias

Šarenac, T. M., & Mikov, M. (2018). Bile acid synthesis: from nature to the chemical modification and synthesis and their applications as drugs and nutrients. *Frontiers in Pharmacology*, *9*, 387752.

Maitra, U. (2007). Simple esters of cholic acid as potent organogelators: direct imaging of the collapse of SAFINs. *Soft Matter*, *3*(11), 1428-1433.

Análisis Cinético De Peroxidasa y Polifenoloxidasa en Frutos *Rubus glaucus* y Su Influencia En El Aprendizaje Multidimensional De Cinética Enzimática

Kinetic Analysis Of Peroxidase and Polyphenoloxidase in *Rubus glaucus* Fruits and Their Influence on Multidimensional Learning Of Enzyme Kinetics

Granados, J.[1], Rodríguez, D.[2]

[1]Grupo de investigación GRIPEPZ. Universidad de Cundinamarca, Colombia

[2]Grupo de investigación GIEPRONAL. Universidad Nacional Abierta y a Distancia-UNAD, Colombia

jegranados@ucundinamarca.edu.co

Área Temática: Enseñanza de la Química.

Palabras clave: Constante de Michaelis, Velocidad Máxima, Cambio conceptual, Reducción funcional.

La enseñanza-aprendizaje de la cinética enzimática es difícil, debido a su complejidad y alta estructura conceptual, una de estas reside en la pobre argumentación de los estudiantes sobre la naturaleza y velocidad de las reacciones químicas, debido a su falta de fundamento en Teorías del complejo activado. y colisiones, el otro, está relacionado con las formas de razonamiento espontáneo, basado en la fijación y reducción funcional, que pueden actuar como barreras epistemológicas y metodológicas. La investigación exploró la incidencia metacognitiva del estudio analítico-experimental de las actividades de: peroxidasa-POD y polifenoloxidasa-PFO, provenientes de frutos de mora, sobre el aprendizaje multidimensional de cinética enzimática.

El estudio se realizó con dos grupos de estudiantes de ciencias agrarias, matriculados en Bioquímica Metabólica (BM). Se aplicó un diseño cuasi-experimental prueba-post-prueba, guiado por una estrategia didáctica metacognitiva (EDM), enmarcada en etapas del campo multidimensional de aprendizaje-CMA incluido en modelo educativo digital transmoderno-MEDIT de UCundinamarca; las experiencias cocreativas vivenciales de laboratorio, se centraron en muestreo de frutos, análisis fisicoquímicos, extracción de enzimas y estudio cinético de POD y PFO. El mejor avance conceptual se presentó en conceptos como: pH, índice de acidez, penetrabilidad, temperatura, orden de reacción, teoría del complejo activado y ecuación cinética, mientras que se percibió mayor dificultad en: Constante de velocidad, energía de activación, constante de Michaellis y mecanismo de reacción; respecto al componente experimental, los estudiantes determinaron: Temperatura óptima, pH óptimo, constantes de Michaelis, velocidad máxima y ecuaciones cinéticas para POD y PFO extraídas de frutos provenientes de la región del Sumapaz; la POD presentó mejor actividad a un pH de 6,7 con una velocidad máxima promedio de 1,983 $\Delta A/g.min$ y Km de 3,070 µmol H_2O_2/mL. Se observó un cambio conceptual y metodológico significativo ($P<0.05$) en los puntajes promedio de los instrumentos aplicados, lo cual se puede atribuir a las fases cocreativas aplicadas en la estrategia didáctica, dado que consideró conocimientos previos de los estudiantes y la analítica de datos obtenida en todo el proceso; así mismo, se destacó la actitud proactiva y cocreativa hacia el aprendizaje de cinética enzimática aplicada en las ciencias agropecuarias

Referencias

Cachapuz, A and R, Maskill (2007). Journal of science education, 9 (4). Pp 491-504

Análisis Cinético De CH_4 y Propiedades Fisicoquímicas De Bioles, Generados Por Biodigestión Anaeróbica De Excretas en Biodigestores De Membrana

Kinetic Analysis Of CH_4 and Physicochemical Properties Of Biols, Generated By Anaerobic Biodigestion Of Excreta in Membrane Biodigesters

Granados, J.[1], Abril, D.[2], Mogollón, A.[3], Beltrán, A.[4]

[1]Grupo de investigación GRIPEPZ. Universidad de Cundinamarca, Colombia

[2,3,4] Grupo de investigación SISPROS. Universidad de Cundinamarca, Colombia

jegranados@ucundinamarca.edu.co

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola.

Palabras clave: modelo cinético; Gompertz; metano; efluente; afluente, AOAC.

Entre algunas tecnologías renovables, la biodigestión anaeróbica (BDA) se considera una metodología atractiva, verificada y ampliamente utilizada para la conversión de biomasa proveniente de residuos agrícolas y forestales, desechos sólidos municipales, etc. (Appels, *et al.*, 2011). El proceso se desarrolla mediante reacciones bioquímicas microbianas enfocadas a transformar la materia orgánica en biogas y residuos denominados bioles, ricos en nutrientes como N, P, K, que los posibilitan para usar en fertilización y enmienda de suelos agrícolas. BDA se realiza en cuatro etapas: hidrólisis, acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis; la generación de CH_4 se puede seguir mediante modelos cinéticos de Gompertz y Monod. Analizar el comportamiento experimental de CH_4 y bioles producidos por biodigestión anaeróbica de excretas bovinas y porcinas, mediante modelos de cinética química. Se recolectaron datos en campo provenientes de cuatro (4) biodigestores de geomembrana instalados en predios cercanos al municipio de Fusagasugá, (Colombia) cuyos afluentes correspondieron a excretas bovinas y porcinas, el seguimiento a la producción de CH_4 se realizó mediante medidor multiparamétrico de gases A-ALT5X-ALKB; se recolectaron bioles durante seis (6) semanas para su análisis biofisicoquímico (pH, sólidos totales disueltos-TDS, Carbono Orgánico-CO, Conductividad eléctrica-CE, N, P, K) mediante técnicas analíticas instrumentales (AOAC.,2023). Mediante diseño completamente al azar (DCA) se encontraron diferencias significativas ($p<0,05$) entre los parámetros cinéticos evaluados, expresados a través de los modelos experimentales aplicados, y también en indicadores biofisicoquímicos de efluentes; esto se puede atribuir a: tipo y composición del afluente, temperatura del biodigestato, pH y evolución del DQO. Biodigestores abastecidos con excretas porcinas exhibieron mejor comportamiento cinético y en calidad biofisicoquímica de bioles, superando significativamente ($P<0,05$) a los que desarrollaron BDA con estiércol bovino; el volumen acumulado de biogas y las concentraciones de CH_4 en el tiempo, fueron explicados adecuadamente mediante los modelos cinéticos de Gompertz y Monod (B. DEEPANRAJ, *et al,* p.2, 2015)

Referencias

APPELS, L. *et al* (2011) “Anaerobic digestion in global bio-energy production: potential and research challenges”, Renewable and Sustainable Energy Reviews, 15(9): 4295-4301

Estudios Estructurales y Biosintéticos De La Melleína y La Hidroximelleína, Metabolitos Secretados Por El Hongo Fitopatógeno *Macrophomina phaseolina*

Structural and Biosynthetic Studies Of Mellein and Hydroxymellein, Metabolites Secreted By The Phytopathogen Fungus *Macrophomina phaseolina*

Barúa, J. E. [1], Almada, L.[1] Ruíz Díaz-Mendoza, D.,[1], Vaceque, J.[1], Flores-Giubi, M.E., Romero-Rodríguez, M.C., Iehisa, J.C.M.[2]

[1]Universidad Nacional de Asunción, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Química Biológica, Asunción, Paraguay.

[2]Universidad Nacional de Asunción, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Biotecnología, Asunción, Paraguay.

javierbarua@qui.una.py

Área Temática: Química de productos naturales y farmacéuticos.

Palabras Clave: Metabolismo secundario, biosíntesis, fitotoxinas.

Macrophomina phaseolina (Tassi) Goid. es un hongo fitopatógeno que infecta muchas especies vegetales. Provoca pudrición de raíces y tallos generando pérdidas económicas en cultivos. Se han identificado varios metabolitos secundarios secretados por *M. phaseolina*, entre ellos, melleína e hidroximelleína que están asociados al efecto fitotóxico del hongo. El objetivo del trabajo fue evaluar el efecto de la raíz de soja en la secreción de melleína e hidroximelleína de *M. phaseolina* e identificar los genes candidatos implicados en la biosíntesis.

Se utilizó un aislado nativo de *M. phaseolina*, obtenido de cultivos de soja. La raíz de soja se obtuvo de soja la variedad SOJAPAR-R19. *M. phaseolina* fue cultivado en botellas Roux, que contenían medio de cultivo liquido Czapek Dox Modificado (CZPm) o Papa-Dextrosa-Caldo (PDB); con o sin raíz de soja. Luego de cinco días, se separó el micelio del medio de cultivo por filtración. El filtrado se sometió a extracción orgánica liquido-liquido. El extracto orgánico fue utilizado para obtención de los compuestos purificados mediante cromatografía en columna. Melleina e hidroximelleina fueron identificados mediante RMN-^{1}H y RMN-^{13}C. La secreción y cuantificación de melleína e hidroximelleína en los medios de cultivo con o sin raíz de soja se evaluaron mediante HPLC-UV. Se realizó un análisis *in silico* en el genoma de *M. phaseolina* para búsqueda de genes candidatos implicados en la biosíntesis.

Se encontró mayor secreción de melleína en el medio PDB sin raíz y una mayor secreción de hidroximelleína en el medio CZPm con raíz. Hemos identificado posible el clúster de genes implicados en la biosíntesis de melleína en el genoma de *M. phaseolina* utilizando la herramienta AntiSMASH versión fúngica. Los experimentos para demostrar la implicancia de este clúster de genes en la biosíntesis de estos metabolitos están en curso. Este trabajo aporta información valiosa para la comprensión de la biosíntesis de ambos metabolitos.

Referencias

Khambhati VH, Abbas HK, Sulyok M, Tomaso-Peterson M, Thomas Shier W. (2020). First report of the production of mycotoxins and other secondary metabolites by *Macrophomina phaseolina* (Tassi) Goid. isolates from soybeans (*Glycine max* l.) symptomatic with charcoal rot disease. *Journal of Fungi*. 6(4): 332.

Nanopartículas De PLGA De Diferente Peso Molecular (Mw): Preparación, Caracterización Fisicoquímica y Unión/internacionalización Por Células Del Sistema Fagocítico Mononuclear.

PLGA Nanoparticles Of Different Molecular Weight (Mw): Preparation, Physicochemical Characterization, and Binding/Internalization By Cells Of The Mononuclear Phagocytic System

Cruz Jennifer T.[1, 2], Álvarez Karen[3], Orozco Víctor H.[1], Rojas Mauricio[3], Giraldo Luis F.[1]

[1]Laboratorio de Investigación de Polímeros (LIPOL), Instituto de Química. Universidad de Antioquia (UDEA), Medellín; Colombia.

[2]Facultad de Ciencias Básicas. Universidad de la Amazonia (UDLA), Florencia; Colombia.

[3]Grupo de Inmunología e Inmunogenética Celular (GICIG), sede de Investigación Universitaria (SIU). Universidad de Antioquia (UDEA), Medellín, Colombia.

jennifer.cruz@udea.edu.co

Área temática: Química de Materiales-

Palabras clave: cinética de liberación de fármacos, nano precipitación, difusión.

El objetivo de este estudio fue sintetizar las nanopartículas de ácido poli-láctico-co-glicólico (PLGA) cargado con curcumina (CUR) para comprender cómo las condiciones de diseño influyen en las propiedades fisicoquímicas y la unión/internalización por células del sistema fagocítico mononuclear. Los métodos de emulsión simples por evaporación de solventes (ESE) y el método de nano precipitación (NPM) se usaron para sintetizar NPs de PLGA de diferente peso molecular (Mw) (comercialmente conocido como Resomer 502H, 503H y 504H). Los NP se caracterizaron en función del tamaño promedio de partículas, el índice de polidispersidad (PDI), ζ-potencial, eficiencia de encapsulación (EE), morfología y cinética de liberación. Además, la unión/internalización se determinó in vitro usando leucocitos circulantes por citometría de flujo.

El tamaño promedio fue < 200 nm; de forma esférica, ζ-potencial ~ -40 MV, PDI <0.26 y % EE para CUR > 94 % de los NP. Los métodos evaluados no mostraron diferencias en el PDI o el EE (%), mientras que el NPM permitió obtener los NP más grandes (~ 180 nm), ζ potencial ~ -30 mV. La cinética mostró que la liberación de CUR se explica por un patrón de difusión consistente con el modelo Higuchi. Demostramos que las NPs de PLGA de Mw intermedio (503H) presentaron las mejores propiedades fisicoquímicas y fueron unidas e internalizadas principalmente por monocitos, en comparación con otras poblaciones de leucocitos, como linfocitos y neutrófilos. Nuestros resultados concluyen que Resomer 503H es un polímero prometedor para diseñar NP con posibles aplicaciones para tratar y diagnosticar enfermedades autoinmunes.

Estudio De Adsorción Monocomponente De Cadmio y Cobre en Biocarbón de *Theobroma cacao* L. Obtenido Por Pirólisis Asistida Por Microondas

Study Of Adsorption Of Single-component Cadmium and Copper in Biochar From *Theobroma cacao* L. Obtained By Microwave-assisted Pyrolysis

Correa, J.[1,2,3], Cabrera, E.[1,3], Stahl, U.[1,3] Rodríguez J.[2]

[1]Facultad de Ingeniería Química, Universidad Central del Ecuador, Quito, Ecuador.

[2]Facultad de Posgrado, Universidad Técnica de Manabí, S/N, Avenida Urbina y Che Guevara, Portoviejo, 130104, Ecuador

[3]Grupo de Investigación en Alimentos, Compuestos Orgánicos, Materiales, Microbiología Aplicada y Energía (ACMME), Quito, Ecuador.

jgcorrea@uce.edu.ec

Área temática: Química Ambiental-

Palabras clave: cinética, equilibro, termodinámica, biocarbón, *Theobroma cacao* L.

La revalorización de desechos orgánicos provenientes de cáscaras de cacao (*Theobroma cacao* L) puede darse mediante la transformación a biocarbón. El biocarbón obtenido de diferentes biomasas ha mostrado ser un potencial material adsorbente para la remoción de contaminantes emergentes y metales. En este contexto se obtuvo mediante pirólisis asistida por microondas biocarbón de cáscaras de cacao y se caracterizó fisicoquímica y morfológicamente. Posteriormente, se evaluaron los parámetros que influyen en la capacidad de adsorción monocomponente de iones metálicos ($Cd^{2+}_{(ac)}$) y ($Cu^{2+}_{(ac)}$) en solución acuosa como son: dosis de adsorbente, tiempo de contacto, dosis de adsorbato y efecto de la temperatura. Se determinó que la dosis adecuada de biocarbón a una concentración de 100 mg/L de adsorbato fue de 1,5 g. El estudio cinético mostró que el tiempo de equilibrio para la remoción se alcanza para $Cu^{2+}_{(ac)}$ y $Cd^{2+}_{(ac)}$ a un tiempo de 60 y 120 minutos respectivamente. El modelo no lineal de Elovich fue el que mejor se ajustó a los datos cinéticos con un R^2 de 0,999 para $Cd^{2+}_{(ac)}$ y 0,989 para $Cu^{2+}_{(ac)}$, indicando que el mecanismo predominante de interacción del proceso de remoción es la adsorción química. Las isotermas de equilibrio se analizaron empleando los modelos de Langmuir, Freundlich y Redlich-Peterson, donde el modelo de Redlich-Peterson demostró ser el de mejor ajuste para los datos experimentales, obteniendo una capacidad de adsorción de 13,81 mg/g $Cd^{2+}_{(ac)}$ y 11,40 mg/g $Cu^{2+}_{(ac)}$. El estudio termodinámico y el cambio de entalpia (ΔH) indican que el proceso de adsorción es de naturaleza endotérmica y el valor para el cambio de entropía (ΔS) es indicativo que existe un aumento aleatorio en la interfaz sólido/líquido. En conclusión, se obtuvo un biocarbón por pirólisis asistida por microondas (720W-15 min) con un rendimiento de 31.80 %, con una buena capacidad de adsorción de $Cu^{2+}_{(ac)}$ y $Cd^{2+}_{(ac)}$.

Referencias

Zambrano-Intriago, L., Gorozabel, M., Mosquera, A., Delgado-Demera, H., Duarte, M., & Rodríguez-Díaz, J. (2022). Kinetics, equilibrium, and thermodynamics of the blue 19 dye adsorption process using residual biomass attained from rice cultivation. Biomass Conversion and Biorefinery, 12. https://doi.org/10.1007/s13399-020-00944-2

Gama, B. M. V. da, Barbosa, C. M. B. de M., Rodríguez-Díaz, J. M., Sales, D. C. S., & Duarte, M. M. M. B. (2022). Adsorption and recovery of cadmium and copper ions in mono and bicomponent systems using peanut shells biochar as a sustainable source: Model development. Chemical Engineering Communications, 209(6), 736-756. https://doi.org/10.1080/00986445.2021.1903885

Clases-Paseo: Posibilidades De Discusión Socio Científica En La Enseñanza De La Química

Class walks: Possibilities Of Socio-Scientific Discussion in The Teaching Of Chemistry

Moreno, N.[1], Messeder, J.[1,2]

[1]Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências da Natureza, Universidade Federal Fluminense, Niterói, Brasil.

[2]Instituto Federal do Rio de Janeiro, Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências, Nilópolis, Brasil.

jorge.messeder@ifrj.edu.br

Área Temática: Enseñanza de la Química.

Palabras claves: clases-paseo, aspectos socio científicos, enseñanza interdisciplinaria.

Este texto presenta un extracto de una investigación de maestría en Enseñanza de la Química, que tuvo como uno de los objetivos desarrollar reflexiones sobre las contribuciones de las clases-paseo[1], combinadas con aspectos sociocientíficos, para promover discusiones étnico-raciales en las clases de Química.

Con ese fundamento, el presente trabajo busca combinar el recurso pedagógico de la rueda de conversación, articulado con aspectos sociocientíficos, para discutir cuestiones raciales que involucran conocimientos de Química, Física y Geografía, además de reflexionar sobre aspectos mediáticos que involucran la salud de los negros, y con ello promover una práctica antirracista en la educación básica.

Las etapas de las clases-paseo realizadas se basaron en los Tres Momentos Pedagógicos propuestos por Delizoicov y Angotti. La actividad pedagógica contó con la participación de alumnos del 2º año de la Enseñanza Media, de escuelas públicas de Río de Janeiro. La caminata de clase tuvo lugar en la Praia do Flamengo, en la que el grupo de alumnos estuvo acompañado por el docente y un asistente de docente, encargados de registrar fotos y videos de la actividad.

Se buscó valorar los discursos de los estudiantes durante las conversaciones, además de las impresiones de la investigadora a través del análisis de imágenes y percepciones durante las actividades. Magalhães Júnior y Batista[3] reiteran que los datos de una investigación cualitativa se obtienen de un ambiente natural, a través del contacto directo entre el investigador y los sujetos. Dichos datos se presentan en forma de imágenes, palabras e impresiones, no de números. Se realizaron preguntas como: "¿Crees que existe una relación entre la Química y la playa?; ¿Los negros necesitan usar protector solar?". Se observó que los estudiantes lograron comprender el racismo presente en las propagandas y la posibilidad de su impacto en el cuidado de las personas negras, lo que se puede evidenciar en los siguientes diálogos: *Profesora: Volviendo a esa pregunta inicial sobre las imágenes de las propagandas de protectores solares, cuando buscamos imágenes de protectores solares en Google. Creo que en la primera página sólo aparece una imagen de una persona negra. ¿Cree que esto perjudica el cuidado de los negros en relación con esta protección? ¿O no? Eso no tiene nada que ver con eso. ¿Qué opinas? Quiero escuchar tu opinión. ¿Esto plantea la pregunta de que no necesito usarlo? Alumno 3: Si, porque la mayoría de las cosas son por influencia. Por ejemplo, si veo anuncio de una marca en la televisión y sol veo gente blanca, no lo voy a querer. Porque pienso que solo funciona con gente blanca. Alumno 4: No creo que tenga nada que ver. Todo el mundo se tiene que proteger. Pero la propaganda es racista.*

El racismo es un sistema poderoso que utiliza las más variadas herramientas para mantener la supremacía blanca. Independientemente de los instrumentos políticos, económicos o mediáticos, la figura negra siempre está en desventaja. Aunque representan el 54% de la población brasileña, los negros están siendo excluidos del diálogo publicitario[4].

La actividad mostró que el abordaje de los aspectos sociocientíficos puede ser un aliado importante de una enseñanza de menos contenido y más articulada con el mundo real. Frente a la cuestión de los protectores solares, y siempre con el objetivo de una enseñanza interdisciplinaria, fue posible problematizar la cuestión de la falta de representación negra en las propagandas de protectores solares, impactando la no utilización de protectores solares por parte de las personas negras.

Referencias

Elias, M. D. C. (2010)**.** *Célestin Freinet: uma pedagogía da atividade de cooperação*. 9 ed. Petrópolis, RJ: Vozes.

Delizoicov, D. & Angotti, J. A. (2000). *Metodologia do Ensino de Ciências*. São Paulo: Cortez.

Magalhães Júnior, C. A. O.; Batista, M. C. (2023). *Metodologia da pesquisa em educação e ensino de ciências*. (2ª ed). Ponta Grossa: Atena. DOI: 10.22533/at.ed.790232604

Silva, N. C., & Nery, J. E. (2020). Reflexos do racismo na publicidade brasileira. *Revista Comfilotec*, ano 6, v. 12. https://revista.fapcom.edu.br/index.php/revista-comfilotec/article/view/398/364

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Un Quimiosensor Fluorescente a Base De Quinolina Para Detectar Iones Cianuro

A Quinoline-Based Fluorescent Chemosensor For Detect Cyanide Ions

Trilleras, J.[1], Mutis-Ayala, M.[1], Insuasty, D.[2]

[1]Grupo de Investigación en Compuestos Heterocíclicos, Universidad del Atlántico, Puerto Colombia, Colombia.

[2]Departamento de Química y Biología, Universidad del Norte, Puerto Colombia, Colombia.

jorgetrilleras@mail.uniatlantico.edu.co

Área Temática: **Química Orgánica.**

Palabras clave: **Quinolinas, Benzotiazol, Emisión Inducida por Agregación, Cianuro, Quimiosensores.**

Las quinolinas y derivados son compuestos heterocíclicos que exhiben actividades biológicas y farmacéuticas. Algunos, muestran propiedades fluorescentes convirtiéndolo en quimiosensores con propiedades de emisión inducida por agregación (AIE), fotoestabilidad y altos rendimientos cuánticos en la detección selectiva de aniones, presentando cambio en sus propiedades de emisión. Propiedades importantes para detectar aniones específicos, principalmente los considerados peligrosos, de riesgo ambiental y a la salud como el ion cianuro.

Partiendo de reactivos y solventes comerciales, vía reacción de Vilsmeier-Haack se sintetizó 2-oxoquinolin-3-carbaldehído. Los aldehídos reaccionan (1:1) con benzotiazolacetonitrilo vía condensación de Knoevenagel, produciendo derivados tipo **q**uinolina-**b**enzotiazol**a**crilonitrilo-(QBA).

A los QBA se evalúo las propiedades fotofísicas en varios solventes a concentración 5μM, el efecto de AIE sobre la luminiscencia en THF-agua, y la respuesta de detección hacia aniones empleando absorción UV-Vis y emisión de fluorescencia en DMSO-agua a concentración 50 μM y 10 equivalentes de cada anión en solución tampón.

En los derivados-QBA se favorece la comunicación electrónica, la geometría plana y agregación fuerte en ambientes solvofóbicos, exhibiendo un comportamiento AIE significativo. Los QBA contienen restos de quinolina, benzotiazol y CN unidos por un grupo vinilo como parte del sistema donador-aceptor de electrones, aumentando la susceptibilidad hacia la adición nucleofílica de iones cianuro, lo que provoca un corte en la comunicación electrónica del sistema conjugado y genera notables cambios ópticos y electrónicos que sirven para detectar la presencia de este ion.

Referencias

Ajani, O. O., Iyaye, K. T., Ademosun, O. T. (2022). Recent advances in chemistry and therapeutic potential of functionalized quinoline motifs. RSC Advances, 12, 18594 – 614. https://doi.org/10.1039/D2RA02896D

Weyesa, A., Mulugeta, E. (2020). Recent advances in the synthesis of biologically and pharmaceutically active quinoline and its analogues. RSC Advances, 10, 20784–93. https://doi.org/10.1039/D0RA03763J.

Caracterización Fitoquímica Del Extracto Etanólico De *piper hispidum* y Evaluación *in vitro* De La Actividad Antimicobacteriana Frente a Bacterias Del Género *mycobacterium*.

Phytochemical Characterization Of The Ethanol Extract Of *piper hispidum* and *in itro* Evaluation Of Antimycobacterial Activity Against Bacteria Of The Genus *mycobacterium*

Naren, J[1,3]., González A[1,3]., Aranaga C[2]., Hernández C[1,3]

[1]Programa de Química Farmacéutica, Universidad Santiago de Cali, Colombia.

[2]Programa de Microbiología, Universidad Santiago de Cali, Colombia.

[3]Grupo de Investigación en Electroquímica y Ambiente (GIEMA). Universidad Santiago de Cali, Colombia.

jorge.hernandez08@usc.edu.co

Área temática: Química de productos naturales y farmacéuticos

Palabras clave: *Piper*, micobacterias, extracto etanólico, metabolitos secundarios

Piper hispidum es una especie nativa presente en Colombia. Esta especie se asocia diferentes actividades farmacológicas entre ellas la actividad antimicrobiana. Se realizó la colecta del material vegetal (Hojas) en el corregimiento de Villa Carmelo Santiago de Cali-Valle del Cauca. Para la obtención del extracto se empleó etanol del 96%. En el fraccionamiento del extracto etanólico se utilizaron los solventes orgánicos (éter de petróleo, acetato de etilo y butanol), además fue utilizada agua destilada. Para adelantar la caracterización por CLAE se empleó acetonitrilo grado CLAE. El tamizaje farmacológico *in vitro* requirió de las cepas bacterianas: *Mycobacterium smegmatis* mc2155. Aislados Clínicos: *M. chelonae*, *M. fortuitum* y *M.abscessus*.

El material vegetal fue secado a 45°C durante 48 horas. La droga molienda y homogenizada (100 g) fue puesta en contacto con etanol 96 % obteniendo extractos secos y posteriormente las fracciones orgánicas. Se realizó un estudio fitoquímico preliminar a partir de pruebas colorimetría[2], y la confirmación fue por cromatografía en capa delgada CCD. Para los perfiles por CLAE se utilizó una columna RP-18 y gradiente agua-acetonitrilo: 5% a 95% ACN en 86 minutos, se empleó detector UV-DAD, procesando a 210 y 280. la actividad antimicrobiana para el extracto etanólico y las fracciones orgánicas mediante el método de dilución en caldo empleando concentraciones entre 2mg/mL y 0.03125mg /mL en placa. Se realizaron ensayos independientes frente a cada una de las cepas *(M. chelonae, M. fortuitum y M.abscessus*). con sus respectivos controles. Se detectó la presencia de grupos fenólicos, glicósidos antracenicos, cumarinas, esteroides y/o triterpenoides, y se evidenció la ausencia de alcaloides, saponinas y glicósidos cardiotónicos, además, se desarrolló unos perfiles cromatográficos por cromatografía liquida de alta eficiencia (CLAE) de los extractos y fracciones, el cual mostraron compuestos de alta, mediana y baja polaridad. La evaluación de la actividad antimicobacteriana de los extractos y las fracciones mediante el método de micro dilución en placa, permitió establecer que el extracto etanólico, así como las fracciones de éter de petróleo y acetato de etilo de *Piper hispidum* inhibieron el crecimiento a una concentración de 2 mg/mL frente a las micobacterias mencionadas y para las fracciones de butanol y agua se evidenció crecimiento mayor a 2 mg/mL. evidenció la actividad antimicobacteriana de los extractos etanólicos y las fracciones de éter de petróleo y acetato de etilo a una concentración de 2 mg/mL frente a cepas de micobacterias evaluadas.

Referencias

S. Cruz; R. Véliz; A. Gómez; L. Álvarez; A. Cáceres; J. Morales; M. Apel; A. Henriquez. (2008). Caracterizacion quimica de los aceites esenciales y extractos de especies mesoamericanas del género Piper como nuevos recursos aromaticos. https://doi.org/10.54495/Rev.Cientifica.EdicionEspecial2008.186%20

Hernández c, Jorge E., (2012). Análisis fitoquímico y de actividad antimalárica de dos especies del género *Cecropia*.

https://repositorio.unal.edu.co/bitstream/handle/unal/10796/1192542.2012.pdf?sequence=1&isAllowed=y

Análisis de la Actividad Antioxidante de la *Verbesina parviflora*

Analysis of Antioxidant Activity in *Verbesina parviflora*

Ruíz, J. [1], Gómez, M.[1,2]

[1]Grupo de investigadores en Química Orgánica de los Productos Naturales, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Morelia, Michoacán, México.

[2]Instituto de investigaciones Químico -Biológicas, Morelia, Michoacán, México.

jgalileoruiz@gmail.com

Área Temática: Química de productos naturales y farmacéuticos.

Palabras clave: *Verbesina parviflora*, Asteraceae, cromatografía, RMN, actividad antioxidante.

Los compuestos aislados de las plantas presentan un papel esencial en el desarrollo de fármacos por lo que resulta fundamental la búsqueda de compuestos con aplicaciones médicas así como la contribución al conocimiento del género *Verbesina* al realizar el estudio fitoquímico de la especie *V. parviflora*, de los metabolitos aislados e identificados, en los extractos de hexanos, acetato de etilo y metanol en hojas y flores de *V. parviflora* se evalúo el potencial antioxidante, de los compuestos aislados.

Distintas partes de la planta Verbesina parviflora y solventes orgánicos fueron empleados para su posterior proceso de trituración y maceración a temperatura ambiente utilizando hexano, acetato de etilo y metanol. Los extractos fueron analizados mediante cromatografía en columna preparativa con gel de sílice 60 y fase reversa C_{18}. Obteniendo los espectros de RMN de ^{1}H a 400 MHz y ^{13}C a 100 MHz. Finalmente evaluar el potencial antioxidante mediante el espectrofotómetro de luz Ultravioleta-Visible.

En el análisis de los extractos hexánico, acetato de etilo y metanol de las hojas y flores de *V. parviflora,* se aislaron e identificaron 14 metabolitos secundarios mayoritarios, se prepararon los derivados alcohólicos y acetilados a través de la modificación de grupos funcionales del α- y β-amirina, chrysosplenol D, la axillarina y la quercetagetina 3-metil éter. A partir de aislamiento de 3 eudesmanos (eudesmenol, ácido ilícico y ácido costico) se propone su relación biosintética.

Se lograron obtener cristales adecuados para su análisis mediante difracción de rayos X del chrysosplenol D, de esta manera se confirma la elucidación estructural realizada mediante espectroscopia de 1D y 2D. Las pruebas de actividad antioxidante a los compuestos aislados permitieron determinar sus CE_{50} favorable para el chrysosplenol D y para el axillarin.

Referencias

Bran-Williams, M. E., Cuvelier and Berset. C. (1995) Use of a free radical method to evaluate to evaluate antioxidant activity. *Lebensm.-Wiss. u.-Techol*, 28, 25.30.

Jain S. C., Jain R., Singh R. (2008) Antimicrobial and Antioxidant Potentials of Verbesina encelioides (Cav.) Benth. and Hook. Fil ex Gray. *Journal of Medicinal Plant 2: 61-65.*

Desarrollo y Caracterización De Polímeros Superabsorbentes Biodegradables Para Una Mayor Retención De Agua y Una Reducción en La Irrigación en La Agricultura.

Development and Characterization Of Biodegradable Superabsorbent Polymers For Greater Water Retention and Reduced Irrigation in Agriculture

Jose A. Ulloa[a], Myleidi Vera[a], Narciso Aguilera[b], Octavio Lagos[c], and Bruno F. Urbano[a]

[a] Departamento de Polímeros, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Concepción, Concepción, Chile.

[b] Departamento de Silvicultura, Facultad de Ciencias Forestales, Universidad de Concepción, Concepción, Chile.

[c] Departamento de Recursos Hídricos, Facultad de Ingeniería Agrícola, Universidad de Concepción, Chillán, Chile

julloa@udec.cl

Área Temática: Química de Materiales.

Palabras clave: hidrogeles, superabsorbente, biopolímeros, polímeros retenedores de agua

La escasez y contaminación de agua dulce han alcanzado niveles alarmantes, planteando desafíos para la producción de alimentos, la salud de los ecosistemas y el suministro de agua en zonas urbanas. Los hidrogeles, basados en polímeros, han demostrado ser prometedores en retener cantidades sustanciales de agua. Estos materiales se clasifican como polímeros superabsorbentes (SAP) cuando su capacidad de absorción de agua excede 100 veces su peso. La mayoría de las investigaciones en esta área utilizan polímeros sintéticos como el ácido poliacrílico, acrilamida y el acrilato de potasio, o sus copolímeros. Sin embargo, estos superabsorbentes sintéticos plantean preocupaciones ambientales debido a su potencial para generar microplásticos contaminantes, limitando así sus aplicaciones agrícolas.

En este estudio, presentamos un SAP biodegradable desarrollado a partir de biopolímeros derivados de la celulosa entrecruzados física y químicamente. Los biopolímeros aportan propiedades hidrofílicas y biodegradables, el entrecruzador químico agrega estabilidad mecánica y el entrecruzador físico permite la expansión de las cadenas de polímero. La optimización del diseño experimental resultó en un hidrogel con una capacidad de absorción de agua de 190 g/g. Es importante destacar que esta tasa de absorción se mantuvo constante en diversos tipos de agua, incluyendo agua Milli-Q, agua del grifo y agua subterránea. Al evaluar las respuestas morfométricas de Solanum lycopersicum a diferentes concentraciones de hidrogel en el suelo, encontramos que los SAP biodegradables ofrecen ventajas distintas sobre sus contrapartes sintéticas. Además, estos hidrogeles biodegradables se desempeñaron de manera comparable a los sistemas de control en condiciones óptimas y facilitaron una notable reducción del 50% en la irrigación requerida. Estudios de retención de agua realizados en suelos arenosos y arenosos-francos revelaron mejoras significativas: un aumento del 28,3% en la retención de agua en suelo arenoso-franco y un aumento del 12,5% en suelo arenoso. Pruebas de degradación, conformes con las normas ISO 20200, confirmaron que el superabsorbente se descompone completamente en 15 días. Estudios toxicológicos, basados en las normas UNE-EN 13432:2001, establecieron que los productos de degradación del hidrogel no afectaron negativamente al crecimiento o desarrollo de las plantas en comparación con el grupo de control.

Caracterización De Metales en Relaves Provenientes De Minería Artesanal De Oro Por Espectroscopia De Absorción Atómica en El Municipio De Suárez Cauca Colombia

Characterization Of Metals in Tailings From Artisanal Gold Mining By Atomic Absorption Spectroscopy in The Municipality Of Suárez Cauca Colombia

Gallo, J[1].

[1]Grupo de Investigación en Química Analítica Ambiental (GIQA), Departamento de Química, FACNED, Universidad del Cauca, Cll 5 # 4-70, Popayán, Colombia

jagallo@unicauca.edu.co

Área temática: Química Analítica

Palabras clave: Minería artesanal, caracterización, metales, absorción atómica.

En el municipio de Suárez, Cauca, Colombia, la extracción de oro con prácticas artesanales es la huellade un poblamiento y forma de trabajo de más de 400 años. Tanto las prácticas relacionadas con el oro de aluvión como del oro de filón son oficios que se conocen y realizan en las diversas zonas rurales del municipio. La roca residual y los relaves generan una mayor exposición del área de la superficie a través de la voladura, molienda y trituración, al concentrar sulfuros en los relaves.

Arenas provenientes de los relaves, estándares de los metales Pb, Cr, Cd, Hg, As, espectrofotómetro de absorción atómica, material de laboratorio.

Se tomaron muestras de los montones de diferentes entables con un peso de 2,000 kg para ser homogenizadas. Se tamizaron por separado con un tamiz de 500 μm. Esta etapa se realizó por triplicado donde se pesó 1,000 g de muestra, se digirieron químicamente, con agua regia proporción 3:1, se filtraron, aforaron a 100 mL con agua des ionizada y se procedió al análisis directamente en el espectrómetro de absorción atómica de llama y se calculó la desviación estándar de los resultados.

Se cuantificaron 6 metales de 44 muestras de diferentes entables con tres réplicas. Las concentraciones de los metales analizados para diferentes relaves fueron: Hg 2,76 a 363,81 mg/kg, Cr: 5,07 a 406,84 mg/kg, Mn: 208,00 a 714 mg/kg, Cd: 0,64 a 398,19 mg/kg, Fe: 27788 a 180424 mg/kg y Pb: 0,74 a 1795,00 mg/kg

En el Distrito Minero del Municipio de Suarez se ha generado un gran volumen de residuos mineros (relaves o botaderos), producidos por la explotación y beneficio de los yacimientos más comunes del territorio. El mercurio cuantificado proviene del residual que se adiciona en el proceso de amalgamación.

Los relaves se obtuvieron de botaderos donde se depositan los materiales después de realizados los procesos de minería y beneficio sobre la roca madre para obtener composiciones puras y valiosas.

Debido a la presencia de concentraciones altas de algunos metales pesados, la aplicación de estos materiales de ingeniería será muy riesgosa para la salud humana.

Referencias

Soto, J. et al. (2020). Chemical Characterization and Mineralogical Analysis of Mining-Metallurgical Tailing from the State of Morelos. In: Li, J., et al. Characterization of Minerals, Metals, and Materials 2020. *The Minerals, Metals & Materials Series. Springer, Cham.* https://doi.org/10.1007/978-3-030-36628-5_49

Adeniyi I. and Grobler, H. (2023). Assessment of heavy metals in tailings and their implications on human health. *Geosystems and Geoenvironment*. 2. 100203. https://doi.org/10.1016/j.geogeo.2023.100203

Desenmarañando La Fotoquímica Del Azul De Toluidina Para El Desarrollo De Aplicaciones en Terapia Fotodinámica

Unraveling The Photochemistry Of Toluidine Blue For The Development Of Photodynamic Therapy Applications

Otero-González, J.[1], Querini-Sanguillén, W.[1], García-Sánchez, M.[1], Miranda, M.[2,3], Salazar, M.[1,3], Greer, A.[4,5], Fuentealba, D.[6], Robinson-Duggon, J.[1,3]

[1]Universidad de Panamá, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Departamento de Bioquímica, Panamá, Panamá.

[2]Universidad de Panamá, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Departamento de Química Analítica, Panamá, Panamá.

[3]Sistema Nacional de Investigación (SNI), Secretaría Nacional de Ciencia, Tecnología e Innovación (SENACYT), Panamá, Panamá

[4]Department of Chemistry, Brooklyn College, City University of New York, Brooklyn, New York, United States

[5]Ph.D. Program in Chemistry, The Graduate Center of the City University of New York, New York, United States.

[6]Laboratorio de Química Supramolecular y Fotobiología, Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Catolica de Chile, Santiago, Chile.

jose.robinson@up.ac.pa

Área Temática: Bioquímica.

Palabras claves: terapia fotodinámica, fotosensibilizador, especies reactivas de oxígeno, fotoquímica.

La terapia fotodinámica (PDT) es una técnica terapéutica mínimamente invasiva actualmente aprobada para el tratamiento del cáncer. Esta técnica utiliza un fármaco fotoactivo denominado fotosensibilizador (PS), que se acumula en la lesión cancerosa o tumor y su posterior irradiación con luz de longitud de onda adecuada genera especies reactivas del oxígeno (ROS). Estas ROS destruyen las células cancerosas oxidando las biomacromoléculas, específicamente las proteínas, los ácidos nucleicos y/o los lípidos, lo que aumenta el estrés oxidativo dentro de la célula e induce la muerte celular por apoptosis, necrosis o autofagia.[1]

El azul de toluidina (TBO^+) es un colorante orgánico catiónico de la familia de las fenotiazinas que una vez irradiado, puede erradicar diversos agentes microbianos *in vitro*,[2] tiende a acumularse en células tumorales *in vivo* y se utiliza en aplicaciones tópicas desde hace más de treinta años para ayudar a detectar ciertos tipos de cáncer de la cavidad oral y del tracto gastrointestinal superior.[3]

Para desarrollar aplicaciones en la PDT es importante tener en cuenta los procesos fotooxidativos autosensibilizados emprendidos por el TBO^+ previamente reportados por nosotros, en los que puede generarse la desmetilación del TBO^+ y otros fotoproductos.[4,5] El TBO^+ presenta ventajas en términos de selectividad para el tejido neoplásico, su carácter anfifílico y su toxicidad en la oscuridad,[6] pero los diferentes procesos fotoquímicos en competencia que surgen tras la irradiación con luz visible limitan su generación de oxígeno singlete. Asimismo, podrían limitar los procesos fotoquímicos de transferencia de electrones. Todo ello podría disminuir el rendimiento del TBO^+ como fotosensibilizador en la PDT.

Durante varios años hemos estado estudiando el uso de TBO^+ y diferentes enfoques para maximizar su generación de oxígeno singlete, tales como la encapsulación supramolecular dentro de los contenedores macrocíclicos cucurbiturilos, derivatizaciones, sistemas de transporte proteícos y biosupramoleculares para aumentar la bioacumulación y mejorar su rendimiento en la PDT.[7,8] Actualmente, estamos trabajando en la generación de fotoproductos del TBO^+ que han

demostrado tener propiedades fotoquímicas y fotofísicas interesantes, los estamos caracterizando para evaluar su desempeño como fotosensibilizadores para el desarrollo de aplicaciones en la PDT para el tratamiento del cáncer.

Referencias

Mariño-Ocampo, N., Dibona-Villanueva, L., Escobar-Álvarez, E., Guerra-Díaz, D., Zúñiga-Núñez, D., Fuentealba, D., & Robinson-Duggon, J. (2023). Recent Photosensitizer Developments, Delivery Strategies and Combination-based Approaches for Photodynamic Therapy. Photochemistry and Photobiology, 99(2), 469-497.

Wilson, M., Burns, T., Pratten, J., & Pearson, G. J. (1995). Bacteria in supragingival plaque samples can be killed by low-power laser light in the presence of a photosensitizer. Journal of Applied Microbiology, 78(5), 569-574.

[3] Epstein, J. B., Oakley, C., Millner, A., Emerton, S., Van Der Meij, E., & Le, N. (1997). The utility of toluidine blue application as a diagnostic aid in patients previously treated for upper oropharyngeal carcinoma. Oral Surgery, Oral Medicine, Oral Pathology, Oral Radiology, and Endodontology, 83(5), 537-547.

Robinson-Duggon, J., Mariño-Ocampo, N., Barrias, P., Zúñiga-Núñez, D., Günther, G., Edwards, A. M., ... & Fuentealba, D. (2019). Mechanism of visible-light photooxidative demethylation of toluidine blue O. The Journal of Physical Chemistry A, 123(23), 4863-4872.

Otero-González, J., Querini-Sanguillén, W., Torres-Mendoza, D., Yevdayev, I., Yunayev, S., Nahar, K., ... & Robinson-Duggon, J. (2024). On the mechanism of visible-light sensitized photosulfoxidation of toluidine blue O. Photochemistry and Photobiology, 100, 772-781.

Tremblay, J. F., Dussault, S., Viau, G., Gad, F., Boushira, M., & Bissonnette, R. (2002). Photodynamic therapy with toluidine blue in Jurkat cells: cytotoxicity, subcellular localization and apoptosis induction. Photochemical & Photobiological Sciences, 1(11), 852-856.

Robinson-Duggon, J., Perez-Mora, F., Valverde-Vasquez, L., Cortes-Arriagada, D., De la Fuente, J. R., Gunther, G., & Fuentealba, D. (2017). Supramolecular reversible on–off switch for singlet oxygen using cucurbit [n] uril inclusion complexes. The Journal of Physical Chemistry C, 121(39), 21782-21789.

Robinson-Duggon, J., McTiernan, C. D., Muñoz, M., Guerra, D., Álvarez, E. E., Andrade-Villalobos, F., ... & Fuentealba, D. (2021). Biosupramolecular complexes of amphiphilic photosensitizers with human serum albumin and cucurbit [7] uril as carriers for photodynamic therapy. Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology, 223, 112284.

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Evaluation Of The Residuality Of Persistent Organic Pollutants and Metals in Tropical Fruits From La Unión, Antioquia, Colombia

Evaluación De La Residualidad De Contaminantes Orgánicos Persistentes y Metales en Frutas Tropicales De La Unión, Antioquía, Colombia

Castañeda, M.[1*], Avila, BS[1], Gallego-Ríos, SE[1], Peñuela, GA[1]

[1]Grupo Diagnostico y Control de la Contaminación - GDCON, Facultad de Ingeniería, Sede de Investigación Universitaria (SIU), Universidad de Antioquia - UdeA, Calle 70 # 52 -21, Postal Code 050010, Medellín, Colombia.

jovan.castaneda@udea.edu.co

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola

Palabras clave: Monitoreo ambiental, riesgo probabilístico, límites máximos de residuos, Cromatografía de gases, absorción atómica

Colombia es un país agrícola en desarrollo en el cual la comercialización de frutas representa alrededor del 14% del producto interno bruto del sector agrícola. A pesar de la necesidad de evaluar la residualidad de contaminantes hay pocos estudios sobre Compuestos Orgánicos Persistentes (COP) y metales pesados los cuales representan un riesgo para la salud por su capacidad de acumulación y alta toxicidad. El presente estudio evaluó la residualidad de plaguicidas organoclorados (OCP), hidrocarburos aromáticos (PAH), bifenilos policlorados (PCB), mercurio (Hg), cadmio (Cd), cromo (Cr), plomo (Pb), y arsénico (As) en frutas y suelo. Además, se determinó el riesgo probabilístico no-cancerígeno y cancerígeno asociado a dicha residualidad. La máxima concentración de Hg fue en aguacate (367 ± 66,0 µg/kg), en Pb en Uchuva (612 ± 129 µg/kg) y de As en aguacate (179 ± 32,0 µg/kg), 10 muestras analizadas superaron el límite máximo de residuos (LM) para Hg (10 µg/kg), Pb y As (100 µg/kg). En suelo, la concentración de Hg estuvo entre 0.614 - 8.88 mg/kg, > LM (0,45 mg/kg), en As entre 0,077 - 0,367 mg/kg < LM. Para Cd las concentraciones oscilaron entre 2,21 y 7,57 mg/kg, >LM (1 mg/kg). En Cr, las concentraciones fluctuaron entre 1,34 y 19,6 mg/kg <LM. Además, se encontró una correlación entre las concentraciones de Pb y As en fruta (r=0.724), en suelo Hg y Cr (r=0.779), indicando posibles fuentes similares. El riesgo a efectos no-cancerígeno del Hg fue 1.4 en el percentil 75 HQ>1 lo cual indico que un 25% de la población podría tener un riesgo en la salud. En cuanto a COPs, en OCPs en frutas el Heptacloro fue el más recurrente con un valor máximo de 0,2189 ±0,05253 µg/kg, <LM; en suelos el DDE se encontró en 5 muestras con un valor máximo de 81,14 ±14,47 µg/kg. En suelos se encontraron algunos congéneres el PCB 123, 126, 157,167. En el caso de los PAHs se encontraron en suelos y frutas concentraciones de fenantreno, pireno, y fluranteno. Los hallazgos de este estudio resaltan la importancia de evaluar la residualidad de contaminantes en frutas tropicales y suelos agrícolas en Colombia.

Referencias

Mawari, G., Kumar, N., Sarkar, S., Daga, M. K., Singh, M. M., Joshi, T. K., & Khan, N. A. (2022). Heavy Metal Accumulation in Fruits and Vegetables and Human Health Risk Assessment: Findings From Maharashtra, India. *Environmental Health Insights*, *16*, 11786302221119152. https://doi.org/10.1177/11786302221119151

Sun, X., Ng, C. A., & Small, M. J. (2018). Modeling the impact of biota on polychlorinated biphenyls (PCBs) fate and transport in Lake Ontario using a population-based multi-compartment fugacity approach. *Environmental Pollution*, *241*, 720–729. https://doi.org/10.1016/J.ENVPOL.2018.05.068

Caracterización Fisicoquímica y Modelamiento Cinético De un Combustible Verde en Una Llama De Flujo Opuesto

Physicochemical characterization, and kinetic modeling of a green fuel in an opposed flow flame

Juan D. Ripoll [a,b,c*], Adamu Alfazazi[b], Felipe Bustamante [c], Yu Wang [b], Sol M. Mejía[d], Sung Woo [b], Bassam Dally[b], Mani Sarathy [b], Sukho Chung [b] .

[a] Semillero Química Verde & Sostenible, Facultad de Ciencias Exactas y Aplicadas, grupo de Investigación ALQUIMIA, Instituto Tecnológico Metropolitano, Medellín, Colombia

[b] Clean Combustion Research Center, King Abdullah University of Science and Technology, Thuwal, Saudi Arabia

[c] Environmental Catalysis Research Group, Chemical Engineering Department, School of Engineering, Universidad de Antioquia UdeA. Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia

[d] Línea de Investigación en Química Computacional, Grupo de Investigación Fitoquímica Universidad Javeriana (GIFUJ), Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Pontificia Universidad Javeriana, Bogotá´ 110231, Colombia.

juanripoll@itm.edu.co

Área Temática: Química Física.

Palabras claves: Carbonato de Dietilo, Reducción de Hollín, Llama de Flujo Inverso, Modelamiento Cinético.

En busca de los objetivos de desarrollo sostenible, existe una gran preocupación a nivel mundial por la dependencia, el carácter no renovable y la contaminación atmosférica que resulta del uso de combustibles fósiles. Como estrategia de mitigación se usan aditivos oxigenados de fuentes renovables, y el buen entendimiento de los mecanismos y la cinética de combustión de estos aditivos es un factor clave en la reducción de contaminantes. La síntesis con química verde y el uso de dos aditivos oxigenados como lo son el carbonato de dimetilo (DMC) y el carbonato de dietilo (DEC) a partir de metano o Etanol y dióxido de carbono, ha permitido reducir las emisiones de hollín en los motores diésel. Este estudio tiene como objetivo comprender el impacto del DMC y DEC en la formación de hollín en llamas de difusión de etileno. Los experimentos se realizaron utilizando una configuración de llama de difusión de flujo opuesto a presión atmosférica. Las fracciones de volumen de hollín se midieron mediante un sistema de dispersión y extinción de luz, mientras que la concentración de hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAP) se determinó mediante fluorescencia e incandescencia inducida por LASER y una caracterización fisicoquímica con HNMR, FTIR y GC. Los hallazgos revelaron un efecto sinérgico en la formación de HAP cuando tanto DMC como DEC se mezclaron con etileno, observándose un efecto más pronunciado con DMC. Curiosamente, el DMC favoreció la formación de mayor cantidad de HAP, con respecto al DEC a la misma concentración molar, un comportamiento que no se había informado previamente en la literatura. Se desarrolló un modelo cinético químico apoyado en métodos de química computacional para elucidar nuevas rutas de reacción, para llamas de etileno/DEC y etileno/DMC, incorporando el crecimiento de PAH hasta A7 (siete anillos aromáticos, incluido el coroneno $C_{24}H_{12}$). Este modelo se validó con los resultados experimentales, revelando que el DEC es más eficaz para reducir la formación de hollín que el DMC en condiciones experimentales y fracciones molares idénticas. Estos resultados contribuyen a la comprensión de los mecanismos cinéticos de actuación de carbonatos orgánicos en la reducción de hollín.

Referencias

Juan. D. Ripoll et al, (2015) “Understanding the azeotropic diethyl carbonate–water mixture by structural and energetic characterization of DEC(H_2O) n heteroclusters,” vol. 21, no. 4, p. 93,*J. Mol. Model*

H. Nakamura *et al.*(2015), “An experimental and modeling study of diethyl carbonate oxidation,” *Combust. Flame*, vol. 162, no. 4, pp. 1395–1405, Apr. 2015.

Juan D. Ripoll et al (2024), “The Effects of adding Linear Organic Carbonates on Soot Precursor Formation in ethylene flames” in press *Combust. Flame*

Diseño *in silico* De un Bio-receptor Altamente Selectivo Para El Reconocimiento De Cortisol

***In silico* Design Of a Highly Selective Bioreceptor For Cortisol Recognition**

Fuentes, J.[1*], Guevara, J.[1]

[1]Grupo de investigación en química Aplicada-Facultad de Química, Universidad El Bosque, Bogotá, Colombia.

Jefuentes@unbosque.edu.co

Área Temática: Química de productos naturales y farmacéuticos

Palabras clave: cortisol, bio-receptor, estrés, bio-sensor, hormona.

El cortisol es una hormona reconocida por secretarse en situaciones de estrés y es producida en la capa de la zona fasciculada de la corteza suprarrenal. Esta hormona afecta diversas funciones en el cuerpo debido a la presencia de receptores de glucocorticoides en varios sistemas del cuerpo humano. Evaluar los efectos de esta hormona es crucial, sin embargo, los métodos convencionales para determinar sus niveles requieren visitas especializadas y esperas para obtener resultados, lo que puede retrasar el tratamiento de patologías asociadas con niveles anormales de cortisol. Aunque los biosensores podrían ser una alternativa, su elemento de reconocimiento proteico es susceptible a cambios de temperatura o pH que podrían afectar su funcionamiento óptimo. Por lo tanto, se busca diseñar un bio-receptor, una molécula no proteica, para funcionar como sitio activo de reconocimiento del cortisol en un biosensor.
Para lograrlo, se llevó a cabo inicialmente una búsqueda de receptores biológicos con afinidad por el cortisol en el PDB (Protein Data Bank), identificando entre ellos 6ITP, 2VDY y 8CBY. Posteriormente, se determinaron los sitios activos mediante los respectivos artículos de investigación, seguido de la optimización con el software Maestro y el cálculo de la energía de interacción a través de AutoDock Vina, obteniendo valores de -9,39 (6ITP), -10,87 (2VDY) y -12,12 (8CBY). Después de esto, se analizaron los tipos de interacción con los aminoácidos y sus distancias utilizando el programa Discovery Studio. Con esta información, se está realizando el diseño de varios bio-receptores que incluyeran los aminoácidos interactivos con el cortisol, y simulando el volumen estérico de una proteína utilizando cadenas de polímeros como el poliestireno, empleando el software Avogadro. Finalmente, se evaluará la selectividad de las moléculas diseñadas mediante cálculos de energía de interacción con el cortisol, la cortisona y la corticosterona, seleccionando el bio-receptor con la mayor energía de interacción y selectividad hacia el cortisol.

Referencias:

Bermúdez, J., y Sánchez-Reales, S. (2003). Estrés y burn-out: definition and

prevention. Offarm, 22(5), 117-124. https://www.elsevier.es/es-revista-offarm-4-articulo-estres-burn-out-definicion-prevencion-13112896

A. Angelousi, A. N. Margioris, y C. Tsatsanis, «ACTH Action on the Adrenals», Endotext, jun.

2020, Accedido: 22 de enero de 2024. Disponible en:

https://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK279118/

Uso De La Espectroscopia De Mössbauer en El Control De Calidad De Suplementos Terapéuticos Antianémicos Que Contienen Hierro

Use Of Mössbauer Spectroscopy in Quality Control Of Iron-containing Antianemic Therapeutic Supplements

Juan Antonio Jaén[1,2], Eduardo Chung[1,3]

[1]Grupo de Investigación de Materiales, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

[2]Departamento de Química Física, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

[3]Departamento de Física, Panamá, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

juan.jaen@up.ac.pa

Área Temática: Química de productos naturales y farmacéuticos.

Palabras clave: Espectroscopía Mössbauer, suplementos terapéuticos de hierro, estado del hierro.

La espectroscopía Mössbauer de ^{57}Fe es una herramienta muy eficaz para distinguir entre diferentes compuestos de hierro en una muestra determinada y sus fracciones relativas. Se estudiaron diversos productos farmacéuticos antianémicos que contienen hierro, con el objetivo de analizar el estado y la calidad del hierro de estos productos.

Se estudiaron los productos con diferentes compuestos de hierro (principio activo según lo declarado por el fabricante): Fermarato tabletas (Fumarato Ferroso), Fermafolic 60 M (Fumarato Ferroso), Nature Blend Ferrous Sulfate (Ferrous Sulfate), Gentle Iron® (Ferrous Bis-Glicinato), y FERRUM HAUSMANN® (complejo de hidróxido de hierro (III) polimaltosa).

Los espectros de temperatura ambiente de Fermarato y Fermafolic dieron evidencia clara de que las dos fases del hierro presente: ferroso (Fe^{2+}) como principal con una contribución igual o superior al 96% y férrico (Fe^{3+}) cuya contribución era aproximadamente 4%. La fase ferrosa (Fe^{2+}) corresponde al fumarato ferroso $FeC_4H_2O_4$. El componente férrico está relacionado con un compuesto férrico de alto espín procedente de la oxidación del fumarato ferroso o perteneciente a cualquier otra sal férrica incluida durante la producción. Nature Blend Ferrous Sulfate contenía el sulfato ferroso parcialmente hidratado $FeSO_4{\cdot}xH_2O$ como componente principal (80%), un segundo componente (16%) relacionado con otro compuesto ferroso de alto spin y un componente adicional (4%) relacionado con un compuesto férrico de alto spin. El espectro Mössbauer de la muestra Gentle Iron® consta de varios componentes paramagnéticos que pueden considerarse como quelato de bisglicinato ferroso y los productos de sus modificaciones y/o transformaciones y oxidación debido a la inestabilidad del quelato de bisglicinato ferroso. La fracción total de hierro férrico en el complejo de Hierro es aproximadamente 4%. El suplemento FERRUM HAUSMANN® sólo presenta dos dobletes cuadrupolares típicos del hierro férrico de alto espín. El complejo de hidróxido de hierro (III) polimaltosa da lugar a un espectro Mössbauer con estas características. Este compuesto combina hidróxido de hierro (III) envuelto con polimaltosa, un polisacárido derivado del almidón. La composición química de este complejo se puede escribir como $Fe(OH)_3{\cdot}x$(Polimaltosa).

La espectroscopía Mössbauer puede ser una herramienta muy útil para el control de suplementos terapéuticos que contienen hierro.

Referencias

Alenkina, I.V. et al. (2024) Analysis of the iron states in iron-containing pharmaceutical products using Mössbauer spectroscopy. J. Pharm. Biomed. Anal. 237, 115745,

https://doi.org/10.1016/j.jpba.2023.115745.

Evaluación Del Efecto Citotóxico De LL-37 en Modelos De Membrana Eucariota Por Espectroscopia Infrarroja

Evaluation Of The Cytotoxic Effect of LL-37 on Eukaryotic Model Membranes By Infrared Spectroscopy

Giraldo-Lorza, J. M.[1], Leidy, C.[2], Manrique-Moreno, M.[1*]

[1] Grupo de Bioquímica Estructural de Macromoléculas, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia.

[2] Grupo de Biofísica, Universidad de Los Andes, Bogotá, Colombia.

juan.giraldo77@udea.edu.co

Área Temática: Bioquímica.

Palabras claves: Modelos de membrana, LL-37, péptidos antimicrobianos, interacción lípido-péptido.

La catelicidina humana LL-37 es uno de los péptidos más estudiados y reconocidos por su actividad antimicrobiana de amplio espectro. Este péptido está compuesto de 37 residuos, es catiónico a pH fisiológico y ha demostrado actividad en membranas aniónicas bacterianas. El objetivo de este trabajo fue evaluar el efecto citotóxico de LL-37 en dos modelos de membrana, utilizando extractos de lípidos de eritrocitos y un modelo lipídico sintéticos representativo de la monocapa externa de células eucariotas. Adicionalmente, para comprender las bases moleculares de la interacción lípido-péptido se evaluó la interacción de LL-37 con los lípidos POPC y SM utilizando espectroscopia infrarroja. Se empleó el espectrómetro Tensor II de Bruker con una celda BioATR II para el cambio en la transición de fase lipídica de cada sistema a través del seguimiento del número de onda máximo asociado al estiramiento simétrico del metileno (vsCH2) de las cadenas hidrocarbonadas, un marcador sensible al empaquetamiento de los lípidos. También se determinó con la celda AquaSpec el cambio conformacional de LL-37 en todos los sistemas lipídicos a través del método B-PROT1, un algoritmo multivariante de mínimos cuadrados parciales (PLS) basado en los datos de calibración de 43 proteínas diferentes. Los resultados sugieren que LL-37 es un péptido que genera modificaciones al empaquetamiento de lípidos de eritrocitos y de membrana eucariota a través de un efecto dependiente de la concentración. Además, se observó que los diferentes ambientes lipídicos de interés no indujeron un cambio conformacional al péptido, comprobando que LL-37 adquiere una estructura helicoidal principalmente en ambientes cargados negativamente. Este estudio sugiere que las diferencias en el perfil lipídico de las células y en especial aquellos con colesterol presentan consecuencias notables en la interacción con LL-37 modulando así su interacción y actividad.

Agradecimientos: Proyecto CODI 2024-66871.

Referencias

Bhattacharjya, S., Zhang, Z., & Ramamoorthy, A. (2024). LL-37: Structures, Antimicrobial Activity, and Influence on Amyloid-Related Diseases. *Biomolecules*, *14*(3).

Ridyard, K. E., & Overhage, J. (2021). The Potential of Human Peptide LL-37 as an Antimicrobial and Anti-Biofilm Agent. *Antibiotics (Basel)*, *10*(6).

Síntesis Electroquímica De Óxidos De Níquel y Cobalto Soportados en Espumas De Níquel

Electrochemical Synthesis Of Nickel and Cobalt Oxides Supported on Nickel Foams

Ocampo-Guzmán, J.[1], Cortés, M.T.[1]

[1]Laboratorio de Electroquímica y Materiales Poliméricos, Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia

j.ocampog@uniandes.edu.co

Área Temática: Química de Materiales.

Palabras clave: electrosíntesis, espuma de níquel, recubrimiento, OER.

La síntesis electroquímica es un método útil para la fabricación de óxidos metálicos en la superficie de un material. Esta técnica proporciona ventajas como el control del espesor, de la composición y de la pureza de las capas formadas de manera sencilla. Además, la técnica presenta una buena relación costo-beneficio pues emplea cantidades pequeñas de reactivos y genera un mínimo de desechos. Otra ventaja importante es que esta metodología implica la incorporación del material sintetizado en el soporte del electrodo que conecta al circuito en electrolizadores, lo que mejora la reproducibilidad del sistema y disminuye costos.

En este trabajo se realizó la electrosíntesis de recubrimientos de óxidos de níquel y cobalto sobre espumas de níquel. Se usó una disolución de cloruro de cobalto con nitrato de sodio (pH 5,0) como electrolito soporte, una espuma de níquel como electrodo de trabajo, una malla de platino como contraelectrodo y un electrodo Ag/AgCl como referencia. Se aplicó un potencial constante de −1,2 V vs Ag/AgCl por diferentes tiempos de síntesis (50, 100, 400, 500 s). Los electrodos obtenidos se sinterizaron por 1 hora (300, 400, 500 °C). Se utilizaron espumas de níquel para ser modificadas por electrosíntesis con un recubrimiento de óxidos de níquel y cobalto con diferentes espesores. La primera etapa implicó la formación de capas de hidróxidos de níquel y cobalto mediada por el incremento local del pH en la superficie de la espuma.

La estabilidad de estos electrodos se evaluó mediante cronopotenciometría a 10 mA/cm^2, cronoamperometría a 1 V (vs Ag/AgCl) y voltamperometría cíclica en KOH (1 M). Los resultados demuestran buena estabilidad en medio alcalino. Finalmente, se observó buena actividad electrocatalítica de estos materiales para la producción de oxígeno (OER), por lo cual se empleó la voltametría de barrido lineal (LSV) para caracterizar su operación. La espuma modificada presenta sobrepotenciales cercanos a 400 mV para la reacción OER, el cual es menor que el de la espuma prístina.

Referencias

Gao, D., Li, H., Wei, P., Wang, Y., Wang, G., & Bao, X. (2022). Electrochemical synthesis of catalytic materials for energy catalysis. *Chinese Journal of Catalysis 43*(4), 1001-1016. https://doi.org/10.1016/S1872-2067(21)63940-2

Síntesis De Oximas Derivadas De Alquilacilpirazolonas

Synthesis Of Oximes From Alkylacylpyrazolones

Belmar, J.[1], Muñoz, H.[1], Muñoz, F.[1], Jiménez, C.[1], Valenzuela, L.

[1]Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Concepción, Concepción, Chile.

[2]Instituto de Ciencias Químicas, Facultad de Ciencias, Universidad Austral de Chile, Valdivia, Chile.

jbelmar@udec.cl

Área Temática: Química Orgánica.

Palabras clave: pirazolonas, oximas, tautomerismo, síntesis, extracción.

El heterociclo pirazolona reportado por primera vez por L. Knorr hace más de 100 años ha recibido mucha atención por las aplicaciones de algunos de sus derivados. En particular las 4-acilpirazolonas han sido han sido objeto de mucho estudio por sus propiedades quelantes para muchos cationes en procesos de extracción líquido-líquido. En cambio, las oximas de derivadas de acilpirazolonas han sido escasamente estudiadas, en contraste con el papel que ellas han tenido la Química Analítica y en la hidrometalurgia del cobre y en general en la química de coordinación[1]. La mayor parte de los derivados de pirazolona que se han descrito tienen un grupo fenilo en la posición del heterociclo y no cadenas alquílicas como es usual en quelantes de uso industrial. En este trabajo se describe la obtención de oximas de alquilacilpirazolonas, su caracterización estructural y la evaluación de su capacidad extractiva para cobre y níquel.

La reacción a temperatura ambiente entre acetoacetato de etilo e hidracina conduce a 3-metil-5-pirazolona, que al ser tratada con derivados halogenados (1-bromobutano, 1-bromohexano y 1-bromooctano), calentando a reflujo en dioxano por 48 conduce a 1-alquil-3-metil-5 pirazolonas, que fueron aciladas con cloruro de benzoilo y cloruro de *p*-nitrobenzoilo calentando a reflujo en presencia de $Ca(OH)_2$ en dioxano seco[2]. Las cetonas así obtenidas reaccionan con hidroxilamina (reflujo en etanol), obteniéndose las oximas correspondientes. Los datos espectroscópicos (RMN de ^1H y ^{13}C) indican que está presente un solo tautómero de estos compuestos y que sus estructuras corresponden a hidroxienaminas. Los ensayos de extracción se realizaron contactando soluciones en cloroformo de los seis ligandos con soluciones acuosas de cada cation y a diferentes pH. Los porcentajes de extracción de cobre son de 97% aproximadamente a pH 3, 50% para níquel y 64% para cobalto, ambos a pH 8.

Se sintetizó y caracterizó seis nuevas oximas derivadas de alquilacilpirazolonas. Las etapas de la síntesis tienen rendimientos superiores al 70%, excepto la acilación que solo llega a 50%. Los productos presentan en solución de hidroxienaminas. Estos compuestos son excelentes quelantes para extraer cobre desde soluciones acuosas.

Referencias

J. Belmar, J. Quezada, C. Jiménez, P. Díaz-Gallifa, J. Pasán y C. Ruiz-Pérez, *New. J. Chem.*, 2013, **37**, 2002.

J. Belmar, J. Alderete, M. Parra, C. Zúñiga, *Bol. Soc. Chil. Quím.*, 1994, **44**, 367.

Conviviendo Con Moléculas

Living With Molecules

Daniel Finkelstein Shapiro.[1], Corina-Diana Ceapa.[2], Karen Daniela Pino Morales.[3], Kevin Ore Maldonado.[4], Alexis Uriel Caballero.[5], Carlos Ignacio Rivero Valdez.[6], Katia Pamela Villavicencio Sánchez.[7], Jonathan Eduardo Gómez Gonzales.[8], Ashtin Hanna Larson Leon.[9]

[1]Instituto de química, Universidad Autónoma Nacional de México, Ciudad de México, México.

[2]Instituto de química, Universidad Autónoma Nacional de México, Ciudad de México, México.

[3]Grupo de investigación de electroquímica y medio ambiente (GIEMA), Universidad Santiago de Cali, Santiago de Cali, Colombia.

[4]Instituto de química, Universidad Autónoma Nacional de México, Ciudad de México, México.

[5]Instituto de química, Universidad Autónoma Nacional de México, Ciudad de México, México.

[6]Instituto de química, Universidad Autónoma Nacional de México, Ciudad de México, México.

[7]Instituto de química, Universidad Autónoma Nacional de México, Ciudad de México, México.

[8]Instituto de química, Universidad Autónoma Nacional de México, Ciudad de México, México.

[9]Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima, Perú.

karenpino508@gmail.com

Área Temática: Enseñanza de la Química.

Palabras clave: Divulgación científica, Tecnologías AR/VR, Moléculas interactivas, Juegos educativos, Bacterias multirresistentes.

Se planteó un proyecto de divulgación científica a nivel nacional e internacional creando materiales didácticos mediante el uso de herramientas tecnológicas AR/VR que puedan ser usadas en eventos de divulgación científica, en aulas académicas tanto colegios como universidades. Actualmente se conoce el uso fundamental de las herramientas digitales innovadoras a fin de garantizar la transmisión y difusión de diferentes conceptos complejos en química con énfasis en el cambio de diagramas de plano 2D a 3D. Se plantea el uso de tecnologías AR/VR ya que nos ofrece la oportunidad de visualizar moléculas tridimensionales de forma interactiva con las que podemos ayudar en la comprensión de temáticas complejas en jóvenes y estudiantes fomentando el interés científico.

"Conviviendo con moléculas", aprovecha la realidad aumentada para traducir conceptos químicos complejos en experiencias atractivas y accesibles tanto para estudiantes como para público general. A través de modelos geolocalizados y exhibiciones químicas virtuales interactivas. Donde los participantes pueden utilizar sus celulares para navegar por estructuras moleculares y proteicas, hemos desarrollado juegos basados en cartas del popular juego “UNO” que encapsula modelos de bacterias multiresistentes de alto interés para comprender las infecciones que pueden provocar dichas bacterias y el impacto que tienen para nuestro desarrollo en los próximos años y reacciones químicas que permitan entender de una manera amigable y didáctica el producto resultante de unir dos compuestos químicos por diversas reacciones químicas existentes facilitando la educación de la población general y despertando el interés científico.

Permitiendo tener a futuro un avance tecnológico y sostenible, contribuyendo en el avance científico con el uso de la inteligencia artificial hacia una educación científica fácil y accesible al público general evitando la desinformación. Uno de nuestros mayores objetivos como grupo de trabajo en nuestro proyecto es aportar a los objetivos del 2030 principalmente “educación para todos”.

Este proyecto ha obtenido respuestas positivas del publico donde las moléculas interactivas con juego de cartas, bacterias 3D y las moléculas geolocalizadas han permitido fomentar la ciencia llegando a lo más profundo de la curiosidad del público. Actualmente estamos ampliando esta iniciativa para desarrollar más juegos educativos.

Referencias

Naciones Unidas. (s.f.). Objetivos de Desarrollo Sostenible. Recuperado de:

https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/objetivos-de-desarrollo-sostenible/

Martínez Hung, H., García López, A., Quesada González, O., & Almenares Verdecias, I. (2019). Realidad aumentada en la enseñanza de la química de coordinación y estructura de sólidos. *Atenas*, *2*(46). Universidad de Matanzas Camilo Cienfuegos. Recuperado de:

https://www.redalyc.org/journal/4780/478060100008/html/#:~:text=Resumen%3A%20La%20Realidad%20Aumentada%20(RA,relacionadas%20con%20las%20nuevas%20tecnolog%C3%ADas.

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

El Cómic en La Enseñanza De la Química: Una Propuesta Libertaria

The Comic in The Teaching Of Chemistry: a Libertarian Proposal

Silva, M. S.[1], Santos, K. D.[2]

[1]*Instituto Federal da Paraíba - IFPB, João Pessoa, Brasil.*

Instituto Federal da Paraíba - IFPB, João Pessoa, Brasil.

keliana.santos@ifpb.edu.br

Área Temática: Enseñanza de la Química.

Palabras clave: Pedagogía Libertaria; Metodologías Alternativas de Enseñanza; Pedagogía de Proyecto.

La presente investigación describe el proceso de elaboración de cómics en el cual se abordó el contenido de Soluciones Químicas, de manera contextualizada con el cotidiano de los estudiantes de una escuela pública en Brasil.

Según Silva (2019), las historietas tienen como finalidad acercar a los estudiantes a los contenidos que se imparten, lo que les hará aprender de manera más eficiente, ya que actúan como mediadores en el proceso de enseñanza-aprendizaje, además de contextualizar contenidos pasados.

Esta práctica fue realizada y guiada por la pedagogía libertaria, cuyos principios fundamentales son: valorar la autogestión, el antiautoritarismo entre docente y alumno y la experiencia grupal. Así, la investigación fue realizada con 35 alumnos, en una clase del segundo año de la Enseñanza Media, en una escuela en el municipio de João Pessoa-PB / Brasil. El profesor que dirigía las clases observó que los estudiantes mostraban una gran pasión por los superhéroes y los dibujos animados. Este interés despertó la idea de crear un método de enseñanza innovador que conciliara la teoría y la práctica, haciendo menos monótonas las clases de Química.

La metodología adoptada fue cualitativa, y el desarrollo de la investigación ocurrió en cinco encuentros presenciales, realizados una vez por semana, con duración de 50 minutos cada uno. Por lo tanto, las primeras cuatro clases sirvieron para presentación de este proyecto, entrega de términos de aceptación de la participación en la investigación, prueba diagnóstica sobre los contenidos trabajados y ruedas de conversación sobre historietas y soluciones químicas. Luego, se estipuló un plazo de 15 días para la etapa de elaboración y corrección de las historietas, la cual se realizó íntegramente vía aplicaciones de mensajería WhatsApp y Telegram. Por fin, el quinto encuentro se aprovechó para hacer un diagnóstico final, y los grupos presentaron sus producciones.

Por lo tanto, el uso de historietas puede ser utilizado como herramientas pedagógicas, con el objetivo de construir un proceso de aprendizaje más flexible y dinámico para los involucrados.

Referencias

SILVA, Antony. História em quadrinhos: Uma mediadora no processo de ensino-aprendizagem em Densidade dos Gases do Ensino de Química. Revista Arquivos Científicos (IMMES). Macapá, AP, Ano 2019, v. 2, n. 2, p. 83. Disponível em: https://arqcientificosimmes.emnuvens.com.br/abi/article/view/205/85. Acesso em: 26 Jun. 2023.

Sistemas Catalíticos Heterogéneos y Homogéneos Para La Conversión De Glucosa a 5- Hidroximetilfurfural

Heterogeneous and Homogeneous Catalytic Systems For The Conversion Of Glucose to 5- Hydroxymethylfurfural

Suárez-Suárez, K.[1,2], Guerrero-Fajardo, C[2]., Cortés-Ortiz, W.[1,2]

[1]Investigación en Química Aplicada (INQA), Universidad el Bosque, Bogotá, Colombia. [2]Aprovechamiento Energético de Recursos Naturales (APRENA), Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

krsuarez@unbosque.edu.co

Área Temática: Química de Productos Naturales y Farmacéuticos.

Palabras clave: 5-hidroximetilfurfural, catálisis heterogénea, catálisis homogénea.

El 5-hidroximetilfurfural es una molécula plataforma de alto valor que se implementa en la síntesis de moléculas como ácido levulínico, 2,5-dimetilfurano y 2,5- Ácido furandicarboxílico. Además de esto, el 5-hidroximetilfurfural es utilizado ampliamente como excipiente en la industria farmacéutica. Con base en lo anterior, el presente trabajo evalúa la obtención de 5-HMF a partir de glucosa mediante catálisis heterogénea utilizando catalizadores de V y VW soportados en oxido de silicio y catálisis homogénea, utilizando ácido acético como catalizador.

El proceso catalítico heterogéneo se lleva a cabo mediante un diseño factorial 2^2donde se evalúan los catalizadores V/SiO_2 y VW/SiO_2 a temperaturas de 140 y 180 °C. Para cada ensayo el tiempo de reacción es de 120 minutos, 100 mg de catalizador y una solución de glucosa 3,00 g/L. Para el proceso homogéneo se desarrolla un diseño factorial 2^2donde se evalúan temperaturas de 170 y 200°C y tiempos de reacción de 60 y 120 minutos. En este caso, se utiliza una solución de glucosa de 5,00 g/L y una concentración de ácido acético constante del 10 %V/V. Tanto para el proceso homogénea como heterogéneo se utiliza un reactor discontinuo con atmosfera inerte y la separación, identificación y cuantificación de las moléculas plataforma se desarrolla mediante HPLC utilizando el método de patrón interno.

Por medio de la catálisis heterogénea se observa un rendimiento máximo de 20,60 % en mol obtenidos con el catalizador V/SiO_2 a 180°C. Por otra parte, en el proceso homogénea se observa un rendimiento máximo de 30,50 % en mol a 200 °C y 60 minutos. En ambos casos se evidencia que un aumento de la temperatura favorece la formación del 5-HMF.

Se concluye que en la catálisis heterogénea los metales presentes en el catalizador sólido actúan como sitios ácidos de Lewis, favoreciendo la isomerización de glucosa a fructosa, paso fundamental para la formación de 5-HMF. En el proceso homogéneo el ácido de Brönsted favorece la deshidratación de la fructosa hasta llegar a 5-HMF, siendo el paso más relevante para la obtención de la molécula plataforma.

Referencias

Wang, S., Zhang, M., Guo, D., Feng, J., & Pan, H. (2024). Construction of Lewis-Brønsted bifunctional carbonaceous acidic catalyst for efficient transformation of glucose into 5-HMF. *Fuel*, *363*(October 2023). https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.130991

Yu, M., Zhang, X. F., Yang, S., Bai, Y., Wang, Z., & Yao, J. (2024). Defective MIL-53(Al)-NH2: A bifunctional Lewis-Brønsted acid catalyst for efficient 5-HMF production from glucose. *Journal of Molecular Structure*, *1307*(February), 137976. https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2024.137976

Uso Del Lodo Residual De Una Depuradora Como Soporte De un Catalizador (Dióxido de Titanio) en Fotocatálisis Para La Remoción De Contaminantes Emergentes

Use Of Residual Sludge From a Wastewater Treatment Plant as a Support For a Catalyst (Titanium Dioxide) in Photocatalysis For The Removal Of Emerging Contaminants

Tejada, K.[1], **Colina, G.** [1], **Revilla, C.** [1], **García, K.** [1], **Challco, H.** [1]

[1]Universidad Católica de Santa María, Arequipa, Perú.

ktejada@ucsm.edu.pe

Área temática: Procesos, Tecnología e Innovación,

Palabras clave: Lodos, catalizador, adsorción, fotocatálisis, remoción.

El estudio se centró en la utilización del lodo químico de una planta potabilizadora de agua (LTAP) como recurso para mejorar sus propiedades y emplearlo tanto como material adsorbente como soporte para un catalizador, con el objetivo de acelerar la degradación de contaminantes emergentes, especialmente los colorantes.

Inicialmente, el LTAP fue sometido a un proceso de secado en estufa a 105°C durante 24 horas y activación química con ácido nítrico 0.25 M (LMQ). Posteriormente, se añadió dióxido de titanio (TiO_2) como catalizador, sintetizado previamente a partir de isopropóxido de titanio (IV) y etanol al 96%. Esta mezcla fue agitada, reposada y sometida a un proceso de síntesis a 550°C en una mufla durante 2 horas.

Para caracterizar el lodo y el catalizador, se utilizaron técnicas como FTIR, SEM, DRX y se evaluó su área superficial mediante fisisorción. Luego, se llevaron a cabo pruebas de degradación de colorantes utilizando un simulador solar como fuente de luz, con pruebas adicionales en condiciones de oscuridad para confirmar la acción del catalizador y descartar la mera adsorción.

Los resultados indicaron que la proporción óptima de lodo y catalizador fue de 1:1, demostrando una eficacia notable en la remoción de colorantes, con un porcentaje de remoción del 22.27% y 40.70% para los colorantes RG y RC respectivamente. Sin embargo, al evaluar la remoción del antibiótico Ciprofloxacina, se observó una degradación del 62%, mostrando resultados divergentes respecto a los colorantes, que fueron mayormente adsorbidos.

Este estudio destaca la viabilidad del lodo residual como un recurso valioso en la degradación de contaminantes emergentes, lo que ofrece nuevas perspectivas para abordar los desafíos ambientales asociados con la contaminación del agua. No obstante, se reconoce la necesidad de llevar a cabo investigaciones adicionales para comprender completamente los mecanismos subyacentes y optimizar el proceso para una aplicación más amplia y efectiva en la práctica.

Referencias

Garcia-Segura, S., Ocon, J. D., & Chong, M. N. (2018). Electrochemical oxidation remediation of real wastewater effluents—A review. *Process Safety and Environmental Protection*, *113*, 48–67.

Saravanathamizhan, R., Perarasu, V., & Dhandapani, B. (2021). Advanced oxidation process for effluent treatment in textile, pharmaceutical, and tannery industries. En *Photocatalytic Degradation of Dyes* (pp. 719–745). Elsevier.

Eficiencia Del Lodo De Una Planta Potabilizadora De Agua Como Adsorbente De un Colorante Textil en La Ciudad De Arequipa, Perú

Efficiency Of Sludge Rom a Water Treatment Plant as an Adsorbent For a Textile Dye in The City Of Arequipa, Peru

Challco, A.[1], Colina, G. [1], Revilla, C. [1], García, K. [1], Tejada, K. [1]

[1]Universidad Católica de Santa María, Arequipa, Perú.

anverchahi29@gmail.com

Área temática: Procesos, Tecnología e Innovación.

Palabras clave: Lodos, Valorización, adsorción, tratamiento químico, remoción.

La investigación se centra en la valorización de lodos, subproducto de la potabilización del agua. Estos lodos, carentes de uso específico, implican costos y espacio en su gestión. Se proponen tratamientos térmicos y/o químicos para convertirlos en adsorbentes con el fin de remover contaminantes emergentes, mostrando alta capacidad de adsorción.

El tratamiento térmico se realizó en una mufla a temperaturas de 100 a 700°C, mientras que el tratamiento químico implicó la activación con ácido nítrico a concentraciones de 0.25 a 1 M. Los lodos resultantes se caracterizaron mediante análisis de DRX, FTIR, FRX, SEM y pruebas de adsorción.

Se evaluó la capacidad de adsorción del colorante Pardo B, encontrando que el lodo tratado a 400°C (LT400) y el activado con 0.5 M de HNO_3 (LQ5) mostraron la mayor eficiencia, eliminando hasta un 80 % y un 92 % de la dosis de adsorbente y la molaridad del activante mientras se maximiza la concentración del colorante. Los resultados sugieren una molaridad de activante de 0.25 M, una dosis de adsorbente de 0.5 g/100 mL y una concentración de Pardo B de 100 mg/L, logrando remover hasta un 79 % del colorante bajo estas condiciones óptimas.

Los resultados mostraron que el tratamiento químico cargó el lodo negativamente, favoreciendo la adsorción del Pardo B catiónico por atracción electrostática. El análisis FTIR respalda esta afirmación. Además, dicho tratamiento incrementó el área superficial del lodo, como reveló el análisis de superficie posterior, al modificar su superficie y liberar poros cerrados. Este fenómeno mejoró la capacidad del lodo para adsorber el colorante, al proporcionar más sitios de adsorción disponibles en su superficie.

Concluyendo, estas interacciones fisicoquímicas favorecen la adsorción del colorante Pardo B en un lodo activado con ácido nítrico, lo que resulta en una alta eficiencia de remoción del colorante del medio acuoso.

Referencias

Nageeb Rashed, M., El-Daim El Taher, M. A., & Fadlalla, S. M. (2016). Adsorption of methylene blue using modified adsorbents from drinking water treatment sludge. *Water Science and Technology*, *74*(8), 1885–1898.

Tony, M. A. (2020). Zeolite-based adsorbent from alum sludge residue for textile wastewater treatment. *International Journal of Environmental Science and Technology*, *17*(5), 2485–2498.

Porfirinatos De Metales De Transición Como Bits Cuánticos

Transition Metal Porphyrinates as Quantum Qubits

K. Quintero[1], C. Molina[2], E. Moreno-Pineda[3]

[1]Escuela de Química, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

[2]Departamento de Bioquímica, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

[3]Departamento de Química-Física, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

quinterokimberly30@gmail.com

Área Temática: Química Física.

Keywords: EPR, Inorganic Molecules, Metalloporphyrins, Quantum Computers, Qubits.

Magnetic molecules are inorganic systems of great technological and scientific value and have been proposed in several technological applications such as molecular coolers, quantum sensors, quantum simulators, and as the basic unit of quantum computers, i.e., the quantum bit (qubit). Amongst the aforementioned applications, one of the most important is the implementation of magnetic molecules in Quantum Information Processing (QIP) schemes, acting as qubits. The qubit is a system that can exist in an arbitrary coherence superposition of states. In this regard, metalloporphyrins with $S \geq ½$ are suitable candidates for investigation as qubits (Gaita-Ariño, S. Hill, & Coronado, 2019). Furthermore, metalloporphyrins contain unpaired spins that have been shown to exhibit coupling exchange to magnetic substrates, an aspect of much importance for the inclusion of these systems in hybrid spintronic systems.

Herein we synthesise a porphyrin ligand that will allow us to carry out complexation reactions with metal salts of Mn^{2+}, Co^{2+} and Cu^{2+} producing pseudo-planar inorganic complexes with extended π conjugations, such as metal porphyrinates. The synthetic procedure employed in this work is based on bottom-up approaches, while the purification was carried out through chromatographic techniques, precipitation and crystallisation. The obtained metalloporphyrins were characterised through spectroscopic techniques (UV-Vis, IR, Raman, NMR), mass spectrometry and X-ray crystallography, allowing the unambiguous structural determination of the obtained systems. Moreover, the electronic characterisation was carried out through Electron Paramagnetic Resonance (EPR) spectroscopy and advanced computational calculations such as Density Functional Theory (DFT) and Complete Active Space Self-Consistent field (CASSCF). The synthesis and structural characterisation of a porphyrin and the copper complex of the porphyrin were achieved. Furthermore, EPR studies of the copper-porphyrinate complex show the systems to be characterised by $S = ½$ spin, with a string hyperfine interaction to the nuclear spin and the nitrogen's of the porphyrin. The spin doublet characteristic makes $CuPBr_4$, a plausible qubit candidate. The finding of this work allows us to understand key parameters governing the physical properties of such systems. Furthermore, this study exemplifies the investigations of inorganic molecules in Panama with the view of implementing such systems in quantum technologies.

References

Biard, H., Moreno-Pineda, E., Ruben, M., Bonet, E., Wernsdorfer, W., & Balestro, F. (2021). Increasing the Hilbert space dimension using a single coupled molecular spin. *Nature Communications, XII*(4443). doi:10.1038/s41467-021-24693-6

Gaita-Ariño, A., S. Hill, F. L., & Coronado, E. (2019). Molecular spins for quantum computation. *Nat. Chem., XI*, 301–309. doi:10.1038/s41557-019-0232-y.

Proceso y Beneficios Del Reconocimiento ACS Para Programas Globales De Química a Nivel De Pregrado

Process and Benefits Of ACS Recognition For Global Undergraduate Chemistry Programs

Lawal, Wasiu[1]

[1]Sociedad Química Americana

W_lawal@acs.org

Área Temática: Enseñanza de la Química.

El Comité de Formación Profesional (CPT) de la ACS desempeña un papel fundamental en el establecimiento de directrices y estándares para la aprobación de programas de licenciatura en química en los Estados Unidos. Sin embargo, el compromiso de la sociedad con el fomento de la excelencia en la educación de química a nivel de pregrado se extiende más allá de las fronteras de los Estados Unidos con la introducción de los Programas de Reconocimiento Global hace unos años.

Aprovechando su experiencia, el CPT ha desarrollado directrices internacionales para la evaluación de programas de química fuera de los Estados Unidos, y los programas que se alinean con estos rigurosos estándares reciben el Reconocimiento ACS, lo que indica su compromiso de proporcionar a los estudiantes una educación amplia y rigurosa que cultiva habilidades intelectuales, experimentales y de comunicación esenciales

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Niveles De Trihalometanos y Ácidos Haloacéticos en Aguas De Piscinas y Su Asociación Con Parámetros De Calidad Del Agua

Levels Of Trihalomethanes and Haloacetic Acids in Swimming Pool Water and Their Association With Water Quality Parameters

Hernandez W[1], Vallejo-Vargas OI[1], Alzate EJ[1], Montoya-Navarrete CH[1], Beltrán-Angarita L[1,2]

[1]Grupo de estudio del recurso hídrico, Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira, Colombia.

[2]Grupo Salud Cuidado y Sociedad, Unidad Central del Valle del Cauca, Tuluá, Colombia.

olgavallejo@utp.edu.co

Área Temática: Química Analítica.

Palabras clave: THM; subproductos de cloración; HAA.

La desinfección del agua con cloro genera subproductos como los trihalometanos y los ácidos haloacéticos (THM y HAA), algunos cancerígenos y con potencial efecto adverso en el sistema reproductivo. Nos propusimos determinar los niveles de THM y HAA en aguas de piscinas y su asociación con parámetros de calidad del agua. Se midieron el tiempo de adsorción, la temperatura de adsorción y desorción, la agitación de la muestra y la adición de NaCl. Se analizaron los niveles de THM y HAA en 25 muestras de agua de tres piscinas. Los parámetros de calidad del agua se determinaron siguiendo el Standard Methods Ed23 y los análisis de correlación con el SPSSv23.

El método fue estandarizado en un rango de 5-200 µg/L con un nivel de desarrollo (LOD) en el rango de 3,8 a 7,8 µg/L. El promedio de la concentración de THM y HAA encontrado fue de 41,61±21,5 µg/L y 12675±7320 µg/L, respectivamente. Los compuestos con mayores niveles fueron el cloroformo (21,5±5 µg/L), el ácido tricloroacético (7188 ± 2670 µg/L) y el ácido bromocloroacético (5296±3661 µg/L). La absorbancia ultravioleta específica (SUVA) se asoció con los niveles de THM (coeficiente 0,36, p=0,03). Los niveles de ácidos haloacéticos fueron superiores a los reportados en Estados Unidos, Italia, Alemania, Canadá y Francia y en ciudades colombianas como Medellín. Las concentraciones encontradas en las muestras evaluadas indican la necesidad de más estudios para prevenir su formación y de incorporar un límite máximo permitido en la normatividad nacional, así como establecer un algoritmo predictivo de formación.

Referencias

R. A. A. Carter and C. A. Joll, “Occurrence and formation of disinfection by-products in the swimming pool environment: A critical review,” J. Environ. Sci., vol. 58, pp. 19–50, 2017, doi: 10.1016/j.jes.2017.06.013

T. L. L. Teo, H. M. Coleman, and S. J. Khan, “Chemical contaminants in swimming pools: Occurrence, implications and control,” Environ. Int., vol. 76, pp. 16–31, 2023, doi: 10.1016/j.envint.2023.11.012.

Valorización Termoquímica De Residuos Agroindustriales De Plátano

Valorization Of Agro-Industrial Banana Waste By Hydrothermal Carbonization Process

Vélez, JM.[1], Orozco LM.[1], Zuluaga-Vélez, A.[2], Sepúlveda-Arias, JC.[2], Veloza, LA.[1]

[1]Grupo de investigación Polifenoles, Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira-Colombia.

[2]Grupo de investigación Infección e Inmunidad, Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira-Colombia.

marcely@utp.edu.co

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola

Palabras claves: cáscara de plátano, carbonización hidrotermal, hidrocarbón; agua de proceso, actividades biológicas.

La carbonización hidrotermal (HTC) es un proceso termoquímico que transforma biomasa húmeda en un hidrocarbón, una fase líquida denominada agua de proceso y una fase gaseosa. Estos productos han mostrado tener aplicaciones como enmienda del suelo, combustible sólido, entre otras. En este trabajo, residuos de cáscara de plátano se transformaron por HTC en productos de valor agregado con el objetivo de plantear un proceso agroindustrial enmarcado dentro del concepto de economía circular.

La cáscara de plátano y semillas de *Lactuca sativa* fueron proporcionados por la empresa ASPLABEL en Belén de Umbría (Risaralda). Reactivo DPPH y Folin-Ciocalteu fueron adquiridos de Sigma-Adrich.

La cáscara de plátano se transformó en un reactor bajo diferentes condiciones de humedad (50-85%), temperatura (150-230 °C) y tiempo de residencia (2-4 h). Los hidrocarbones fueron caracterizados mediante análisis próximo, elemental, termogravimétrico y poder calorífico. El agua de proceso fue caracterizada por diferentes parámetros fisicoquímicos, se evaluó su actividad fitoestimulante mediante germinación *in vitro* con semillas de *Lactuca sativa,* se determinó la capacidad antioxidante por el método de DPPH, el contenido de fenoles totales por el método de Folin-Ciocalteu y se cuantificó 5-hidroximetilfurfural.

La caracterización de los hidrocarbones mostró una disminución en el contenido de cenizas, material volátil y O comparado con la materia prima, además, se observó un incremento en el carbón fijo y el contenido de C, que favoreció el aumento del poder calorífico. Los resultados indicaron que el agua de proceso HTC es fitoestimulante, con una alta capacidad en la neutralización de DPPH y contenido de fenoles totales. El análisis de la fase acuosa reveló cambios significativos en el pH, concentración de 5-HMF, la demanda química de oxígeno y la conductividad eléctrica con la variación de la temperatura.

Fue posible obtener hidrocarbones con características deseables para el sector energético. Adicionalmente, los resultados muestran que el agua de proceso es un gran reservorio de compuestos bioactivos.

La carbonización hidrotermal fue eficaz en la gestión de residuos y permitió obtener compuestos bioactivos valiosos con utilidad en aplicaciones de salud, química fina y agricultura.

Referencias

Kleinert, M., & Wittmann, T. (2009). Carbonisation of biomass using a hydrothermal approach: state-of-the-art and recent developments. *17th European Biomass Conference*.

Zhao, P., Shen, Y., Ge, S., Chen, Z., & Yoshikawa, K. (2014). Clean solid biofuel production from high moisture content waste biomass employing hydrothermal treatment. *Applied Energy*, *131*, 345–367. https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2014.06.038

Recubrimientos De Nanoapatitas Sobre Superficies De Titanio Precalcificadas Mediante Ruta Biomimética Acelerada

Nanoapatite Coatings on Pre-calcified Titanium Surfaces By an Accelerated Biomimetic Route

Morejón-Alonso L.[1], García L.C.[1], Alejo L.M.[2], González-Ruiz J.E.[3], Bada N.[3], Sirgado-Pérez N.A[4], González-Martínez E.[5], González-Martínez D.A.[5], Moran-Mirabal J.[5]

[1]Departamento de Química General e Inorgánica, Facultad de Química, Universidad de La Habana, Cuba

[2]Facultad de Ingeniería Biomédica, Universidad Tecnológica de La Habana "José A. Echevarría", Cuba

[3]Centro de Biomateriales, Universidad de La Habana, Cuba

[4]Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad de La Habana, Cuba

[5] Departamento de Química y Química Biológica, Universidad McMaster, Ontario, Canadá

lmorejon@fq.uh.cu

Área Temática: Química de Materiales

Palabras Clave: titanio, hidroxiapatita, precalcificación deposición biomimética, soluciones supersaturadas en calcio.

Las características superficiales y tribológicas de los implantes endooóseos juegan un papel determinante en su interacción con el tejido huésped una vez implantados. Por tal motivo, estos materiales son sometidos a tratamientos superficiales en los cuales se modifican propiedades como topografía, energía superficial, humectabilidad y biocompatibilidad con vistas a mejorar la proliferación y crecimiento celular; y en consecuencia la osteointegración acelerada de los implantes.

El presente trabajo propone la obtención y caracterización de recubrimientos de hidroxiapatita a través de la inmersión del sustrato metálico (Titanio CP-2) - previamente activado por vía química mediante implantación de iones calcio (pre-calcificación) - en una Disolución Sobresaturada en Calcio (SCS) y posterior recocido (800 °C/1 h). Los materiales antes y después de recubiertos, así como los polvos obtenidos como resultado de la precipitación, fueron caracterizados mediante Difracción de Rayos-X, Espectroscopía Infrarroja (FTIR-ATR), Microscopía Electrónica de Barrido y Espectroscopía de Rayos-X de Energía Dispersiva para comprobar la composición química, morfología y microestructura obtenida.

Al reducir el tiempo de pre-calcificación a 4h se observa una red interconectada de cristales nanométricos de titanatos de calcio de tamaño aproximado 60 nm ± 10 nm con alta rugosidad similares a los obtenidos a 24h (Beltrán, 2019); la cual induce la precipitación temprana de hidroxiapatita parcialmente carbonatada luego de 4h de inmersión en SCS. Los recubrimientos obtenidos están formados por cristales de hydroxiapatita a escala micro y nanométrica que poseen cierta orientación preferencial y se encuentran dispuestos de manera homogénea sobre la superficie de titanio. Una vez realizado el tratamiento térmico como vía para incrementar la adherencia de los recubrimientos, estos se densifican y los cristales disminuyen su tamaño; sin embargo, mantienen su composición química. Las modificaciones realizadas durante la activación química del titanio combinado con el uso de soluciones con concentraciones de iones calcio siete veces superiores a la del Plasma Sanguíneo permiten obtener recubrimientos de hidroxiapatita sobre titanio en tiempos inferiores a los reportados en la literatura.

Referencias

Beltrán, A. M. Martin-Santana Y., González J. E., Montealegre-Meléndez I., González E., Peón-Avés E., Gotor F. J. y Torres Y. (2019). Effect of heat treatment on apatite coatings deposited on pre-calcified titanium substrates. *International Journal of Materials Research*, *110*(4),351-358. https://doi.org/10.3139/146.111746

Síntesis y Caracterización De Nuevos Colorantes Derivados Del Pireno Para Su Uso en DSSCs

Synthesis and Characterization Of New Pyrene-derived Dyes For Use in DSSCs

Illicachi, L.[1], Insuasty, B.[2], Ortiz, A.[2]

[1]Grupo de Investigación en Química y Biotecnología, Universidad Santiago de Cali, Cali, Colombia. [2]Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos, Universidad del Valle, Cali, Colombia.

luis.illicachi00@usc.edu.co

Área Temática: Química Orgánica

Palabras clave: Fotovoltaica, DSSCs, Colorante, Pireno, Síntesis Orgánica.

La contaminación ambiental y el cambio climático originado a partir de la quema de combustibles fósiles, está causando un daño irreparable en la diversidad biológica, el clima y la economía mundial. Por lo tanto, para alcanzar el progreso sostenible de nuestra sociedad, el desarrollo de energías renovables alternativas es de gran importancia. Entre estas fuentes de energía alternativa, la energía solar es particularmente atractiva debido a su abundancia, fácil accesibilidad y limpieza. Hoy en día una de las tecnologías más representativas en conversión de energía solar a energía eléctrica son las celdas solares sensibilizadas por colorantes (DSSCs) debido al uso de precursores económicos, simples métodos de fabricación, flexibilidad y buenas eficiencias en conversión de energía.

Una de las partes más importantes que conforman las DSSCs es el colorante; este puede presentar la forma D-π-A, D-D-A, D-D-π-A o D-A-A. El presente trabajo muestra la síntesis y caracterización de seis nuevos sistemas del tipo D-D-A y D-D-π-A (PyTPA-1-6) basados en pireno y trifenilamina como fragmentos donores, tiofeno como puente π-conjugado en tres colorantes y dicianorodanina y dicianohidantoina como fragmentos electroaceptores. Para sintetizar los 6 colorantes se emplearon diferentes rutas sintéticas que comprenden reacciones tales como: Michaelis-Arbuzov modificada, reacción de Horner-Wadsworth-Emmons, borilación de Miyaura, acoplamiento de Suzuki y condensación de Knoevenagel. La elucidación estructural se llevó a cabo mediante técnicas como RMN-^{1}H y ^{13}C, FT-IR y espectrometría de masas. La caracterización optoelectrónica se realizó empleando Uv-Vis, Fluorescencia, Voltamperometria Cíclica y Cálculos computacionales TD-DFT.

Los resultados preliminares muestran que los valores energéticos determinados tanto experimental como teóricamente presentan una disposición favorable en referencia a los requerimientos energéticos de la CB del TiO_2 y los sistemas redox comúnmente utilizados, lo que evidencia su potencial aplicación como colorantes en sistemas de DSSCs.

Referencias

Agarwala, P. & Kabra, D. (2017). A review on triphenylamine (TPA) based organic hole transport materials (HTMs) for dye sensitized solar cells (DSSCs) and perovskite solar cells (PSCs): evolution and molecular engineering. *Journal of Materials Chemistry A*, *5*(4), 1348–1373. https://doi.org/10.1039/C6TA08449D

Calió, L., Kazim, S., Grätzel, M. & Ahmad, S. (2016). Hole-Transport Materials for Perovskite Solar Cells. *Angewandte Chemie International Edition*, *55*(47), 14522–14545. https://doi.org/https://doi.org/10.1002/anie.201601757

Diseño y Síntesis Química De un Análogo De Los Inhibidores De La HMG-CoA Reductasa (estatinas) Mediante QSAR

Design and Synthesis Of a Novel HMG-CoA Reductase Inhibitor Derivate Using QSAR

Guevara, J.[1], Blanco, M.[1], Delgado, D.[1]

[1]Grupo de Investigación en Química Aplicada (INQA), Universidad El Bosque, Bogotá, Colombia.

manuspbn@gmail.com, dpdelgadoc@gmail.com

Área Temática: Química de productos naturales y farmacéuticos

Palabras clave: QSAR, Drug Discovery, Hipercolesterolemia, Estatinas, Inhibidores de la HMG-CoA reductasa.

Las enfermedades cardiovasculares representan un alto impacto en la población mundial, siendo causadas en su mayoría por una elevada concentración de lípidos en sangre, (hipercolesterolemia e hipertrigliceridemia), que desencadena eventos como: infarto agudo de miocardio, ACV, aterosclerosis, enfermedad coronaria. El grupo de fármacos prescritos por excelencia para la hipercolesterolemia son las estatinas (inhibidores de la HMG-CoA reductasa). No obstante, dicho grupo puede presentar efectos adversos graves relacionados con la miotoxicidad tras uso prolongado. Mediante el proyecto realizado, se buscó mejorar el perfil de seguridad de las estatinas.

El proyecto se realizó iniciando con una revisión bibliográfica con fin de obtener valores de actividad biológica experimentales (IC_{50}, CC_{50}) y estructuras tridimensionales para las estatinas comerciales y en desarrollo. Se continuó en simultáneo el estudio *in silico* con cribado virtual basado en estructura (SBVS) y cribado virtual basado en ligando (LBVS); para el primero, se calculó la energía de afinidad de cada molécula con el sitio activo, y se propusieron una serie de análogos de la molécula de atorvastatina siguiendo un enfoque de diseño racional. Para el LBVS, se recopilaron los valores de IC_{50}, CC_{50} y descriptores moleculares con fin de entrenar la red neuronal INQA Neural Network, que permitió predecir la relación estructura-actividad de los análogos propuestos. Finalmente, se sintetizó y caracterizó el análogo 13a (mejor candidato).

La energía de afinidad para el análogo 13a correspondió a -8,8 kcal/mol, con IC_{50} y CC_{50} predichos de 5,67 nM y 0,062 mM respectivamente. Se sintetizó el análogo 13a con un rendimiento final del 41,1%.

En comparación con la atorvastatina (-7,9 kcal/mol, 8,0 nM y 0,061 mM), los valores de afinidad y actividad biológica del análogo sintetizado fueron mejores. Indicando que, se requerirá menor concentración de la molécula 13a para obtener la inhibición de la enzima diana, y mayor concentración de la misma para generar efectos citotóxicos.

En conclusión, el análogo 13a sintetizado presentó mejores valores de afinidad, IC_{50} y CC_{50} en comparación con la atorvastatina, siendo una potencial alternativa a las estatinas más segura para el tratamiento del hipercolesterolemia.

Referencias

Jaramillo, D. N., Millán, D., & Guevara-Pulido, J. (2023). Design, synthesis and cytotoxic evaluation of a selective serotonin reuptake inhibitor (SSRI) by virtual screening. European Journal of Pharmaceutical Sciences, 183, 106403.

Desarrollo De Una Nanoemulsión Agua en Aceite Con Potencial Antioxidante y Fotoprotector a Base De Aminoácidos Tipo Micosporinas

Development Of a Water-in-Ol Nanoemulsion With Antioxidant and Photoprotective Potential Based on Mycosporin-like Aminoacids

Gallego-Villada, M.[1], Muñoz-Castiblanco, T.[1], Mejía-Giraldo, J. C. [1,2], Puertas-Mejía, M. A.[1]

[1]Grupo de Investigación en Compuestos Funcionales, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia.

[2]Facultad de Ciencias Farmacéuticas y Alimentarias, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia.

manuela.gallegov@udea.edu.co

Área Temática: Química Analítica-

Palabras clave: aminoácidos tipo micosporinas; *Porphyra* sp.; nanoemulsión; capacidad antioxidante.

El deterioro de la capa de ozono ha incrementado la exposición a la radiación ultravioleta que penetra en la atmósfera, generando efectos adversos en la salud humana, que incluyen envejecimiento prematuro y aumento en el riesgo de desarrollar cáncer de piel (Vega et al., 2021). El mercado ofrece una amplia variedad de fotoprotectores que contienen filtros solares sintéticos. Sin embargo, ha surgido una creciente preocupación por su pérdida de eficacia y los posibles efectos secundarios en la salud humana y el medio ambiente. Esta problemática, ha generado un aumento en el interés por el uso de compuestos naturales con propiedades antioxidantes y fotoprotectoras, que puedan actuar como filtros orgánicos. En este contexto, los aminoácidos tipo micosporina (MAAs) surgen como una alternativa prometedora. Se ha demostrado que los MAAs poseen capacidad para absorber radiación ultravioleta y presentan propiedades antioxidantes, lo cual puede contribuir a proteger la piel contra los daños causados por la exposición solar (Geraldes & Pinto, 2021). Asimismo, la incorporación de MAAs en una nanoemulsión podría potenciar notablemente su capacidad antioxidante y fotoprotectora.

El objetivo principal de este trabajo fue aislar MAAs presentes en el alga roja *Porphyra* sp. con el propósito de incorporarlas en una nanoemulsión agua/aceite para su potencial uso en formulaciones cosméticas. MAAs fueron obtenidos por extracción asistida por ultrasonido (50/60 Hz, temperatura ambiente, 30 minutos) y purificados mediante cromatografía en columna de silica gel 60. El rendimiento de extracción fue de 5,8%. Los análisis de espectroscopia RMN y espectrometría de masas MALDI-TOF de los MAAs mostraron que están compuestos principalmente por palitina, porfira-334 y usujirene. Además, se demostró el efecto protector de MAAs en las etapas iniciales y finales de la peroxidación lipídica. La emulsión agua en aceite se obtuvo por ultrasonido (1500 Hz 70%) método con 5% (p/p) de agua, 1,5% (p/p) de MAAs y 4,5% (p/p) de emulsificantes (SPAN80/TWEEN80, 8:1). Los resultados de DLS mostraron un tamaño de partícula de 672,8 nm y un índice de polidispersidad de 0,3. Estos hallazgos confirman las propiedades antioxidantes de los MAAs y su incorporación en la emulsión su potencial uso en formulaciones cosméticas con propiedades fotoprotectoras.

Referencias

Geraldes, V., & Pinto, E. (2021). Mycosporine-like amino acids (MAAs): Biology, chemistry and identification features. *Pharmaceuticals, 14*(1), 1-17. https://doi.org/10.3390/ph14010063

Vega, J., Schneider, G., Moreira, B. R., Herrera, C., Bonomi-Barufi, J., & Figueroa, F. L. (2021). Mycosporine-like amino acids from red macroalgae: Uv-photoprotectors with potential cosmeceutical applications. *Applied Sciences (Switzerland) 11*(11). https://doi.org/10.3390/app11115112

Estudio Biofísico Del Mecanismo De Acción Del Péptido NA-CATH-ATRA-1-ATRA-1 en Modelos De Membrana Plasmática

Biophysical Study Of The Mechanism Of Action Of the Peptide NA-CATH-ATRA-1-ATRA-1 in Plasmatic Model Membranes

Marcela Manrique-Moreno[1]

[1]Grupo de Bioquímica Estructural de Macromoléculas, Universidad de Antioquia, Medellín, Antioquia.

marcela.manrique@udea.edu.co

Área Temática: Bioquímica.

Palabras clave: **Péptidos Bioactivos, Modelos de Membrana, Estudios Biofísicos, Espectroscopia Infrarroja, Calorimetría Diferencial de Barrido.**

Los péptidos bioactivos (PBAs) son moléculas generalmente de menos de 50 aa, catiónicas y con un amplio espectro de actividad biológica, que actúan desestabilizando la membrana plasmática. El estudio de la forma en que ejercen su actividad biológica es fundamental para entender su mecanismo de acción. En el presente estudio, se evaluó la actividad a nivel de membrana del péptido NA-CATH-ATRA-1-ATRA-1 en dos modelos de membrana plasmática representativos de células eucariotas y neoplásicas malignas. Estos modelos permiten evaluar la afinidad del péptido por los lípidos de la membrana. El péptido fue sintetizado por la metodología de síntesis en fase sólida. Se prepararon bicapas lipídicas soportadas y liposomas a partir de los lípidos más representativos de membranas eucariotas (PC/PE/SM 59:35:6 w/w) y de membranas malignas (PC/PE/SM/PS 43:33:4:20 w/w) de acuerdo con los reportes de literatura. Para los experimentos de calorimetría diferencial de barrido (DSC) se prepararon liposomas (1mM) y para espectroscopia infrarroja se prepararon bicapas lipídicas soportadas (20mM), en ambos casos a partir de soluciones stocks de los lípidos individuales disueltos en cloroformo o mezclas cloroformo:metanol (1:1). Posterior a la evaporación del solvente, los modelos se hidrataron con buffer (10 mM HEPES, 500 mM NaCl, 1 mM EDTA, pH=7.4) por encima de la temperatura de transición. Los resultados evidenciaron que el péptido NA-CATH-ATRA1-ATRA1 indujo cambios en los parámetros fisicoquímicos de los modelos lipídicos. Finalmente, se evaluó la estructura secundaria del péptido ante los dos modelos de membrana revelando que no se presenta un cambio conformacional relacionado a su estructura. El análisis de los resultados demuestra que el mecanismo de acción del péptido está relacionado con una interacción no selectiva con los lípidos de membrana.

Agradecimientos: Proyecto CODI 2024-66871.

Referencias

Gan, B. H., Gaynord, J., Rowe (2021). The multifaceted nature of antimicrobial peptides: Current synthetic chemistry approaches and future directions, Chem. Soc. Rev., 50 (2021) 7820-7880.

M.C. Klaiss-Luna, M. Jemioła-Rzemińska, K. Strzałka, M. Manrique-Moreno, Understanding the Biophysical Interaction of LTX-315 with Tumoral Model Membranes, Int. J. Mol. Sciences, 24 (2023) 581.

Mejora Del Comportamiento Termico De Aceite De Oliva Virgen Extra Adicionado Con Extractos Vegetales Naturales

Improvement Of The Thermal Behavior Of Extra Virgin Olive Oil Added With Natural Vegetable Extracts

Flores M.[1], Olate-Olave, V.[2,3], Laurie, F.[3], Quitral, V[4], Ortiz-Viedma, J.[5]

[1]Departamento de Horticultura, Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad de Talca, Campus Lircay, Talca, Chile

[2]Instituto de Investigación Interdisciplinaria, Universidad de Talca, Talca, Chile

[3]Laboratorio de Química Enológica, Departamento de Horticultura, Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad de Talca, Campus Lircay, Talca, Chile

[4]Escuela de Nutrición y Dietética. Facultad de Salud. Universidad Santo Tomás. Santiago, Chile.

[5]Departamento de Ciencia de los Alimentos y Tecnología Química, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile

marcos.flores@utalca.cl

Área temática: Química de Alimentos.

Palabras clave: aceite de oliva, termo-estabilidad, compuestos polares, antioxidantes, extractos naturales.

El aceite de oliva extra virgen (AOEV) es ampliamente conocido por sus propiedades beneficiosas debido a sus componentes mayoritarios y minoritarios. Desafortunadamente su alta proporción de dobles enlaces lo hace susceptible a procesos de oxidación. Por otro lado, los sarmientos son considerados residuos de la viticultura, estos residuos se caracterizan por contener compuestos bioactivos, entre los que se destacan compuestos fenólicos con importante actividad antioxidante.

En el presente estudio se utilizaron muestras de AOEV adicionadas (0,8%) con extractos de sarmientos de vides Carignan (Ca), Cinsault (Ci) y País (Pa) separadamente y no adicionados como muestra control (Ct).

Las diferentes muestras de aceite fueron sometidas a un calentamiento de 100°C durante 30 días. Estas se caracterizaron mediante el índice de acidez (IA), porcentaje de compuestos polares (CP) y los parámetros CIELAB. Los extractos naturales se obtuvieron de sarmientos de tres variedades de vid mediante extracción asistida por ultrasonido. Los extractos fueron caracterizados mediante HPLC-DAD-FLD, fenoles totales (FT) mediante el micro-ensayo de Folin-Ciocalteu y su capacidad antioxidante mediante el método DPPH.

A los 30 días de calentamiento se aprecian valores bajos de CP para Ca y Ci (18,8% y 14,5% respectivamente), con respecto Ct (20,7%), así también IA fue más bajo para estos extractos (1,9 y 1,3 respectivamente) con respecto a Ct (2,2). Pa tuvo un efecto negativo sobre CP y IA (21,5% y 2,4). Todos los parámetros L*a*b* disminuyeron durante el estudio. Los FT presentaron un contenido variable (entre 142,9 y 249,8 mg EAG/g extracto). La actividad antioxidante también fue variable (110 y 169 µg/mL (SC_{50})). La determinación mediante HPLC-DAD-FLD mostró dos compuestos mayoritarios, correspondientes a *trans*-viniferina y *trans*-resveratrol.

La presencia de compuestos antioxidantes de Ca y Ci permitió una menor degradación de AOEV en comparación con Pa y Ct. Reflejado en los valores de CP y IA, corroborado por el contenido de fenoles totales y el ensayo DPPH en cada variedad de vid.

Es posible mejorar el comportamiento a altas temperaturas de AOEV durante un periodo de a lo menos 30 días con las variedades Ca y Ci. Esta aplicación favorece la sostenibilidad de productos agropecuarios.

Referencias

Flores, M., Reyes-García, L., Ortiz-Viedma, J., Romero, N., Vilcanqui, Y., Rogel, C., Echeverría, J., Forero-Doria, O. (2021). Thermal Behavior Improvement of Fortified Commercial Avocado (*Persea americana Mill.*) Oil with Maqui (*Aristotelia chilensis*) Leaf Extracts. *Antioxidants*, 10(5), 664. https://doi.org/10.3390/antiox10050664

Sánchez-Gómez, R., Sánchez-Vioque, R., Santana-Méridas, O., Martín-Bejerano, M., Alonso, G.L., Salinas, M.R., Zalacain, A. (2017). A potential use of vine-shoot wastes: The antioxidant, antifeedant and phytotoxic activities of their aqueous extracts. *Industrial Crops and Products* 97, 120-127. https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2016.12.009

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Adsorción De Nitratos y Nitritos Utilizando Arcillas Organofilicas Como Adsorbentes

Adsorption Of Nitrates and Nitrites Using Organophilic Clays as Adsorbents

Sun Kou, M.R.[1], Adauto Ureta, A.[1]

[1]Grupo de Investigación de Metodologías Aplicadas al Control Ambiental y Eficiencia Energética (GICA), Pontificia Universidad Católica del Perú, Lima, Perú.

msun@pucp.edu.pe

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola.

Palabras claves: Bentonita, Arcillas organofílicas, adsorción de nitratos y nitritos, HDTMA, BTEA.

El nitrato es uno de los contaminantes presente en el agua subterránea, debido al uso masivo de fertilizantes nitrogenados. La presencia de nitritos se debe a la reducción de los nitratos por parte de microorganismos biológicos y a los residuos industriales sin tratamiento previo. El consumo de estas aguas contaminadas produce efectos nocivos, especialmente en las mujeres embarazadas y en los niños menores de seis meses, provocando el "síndrome del bebé azul". La Organización Mundial de la Salud (OMS) ha establecido un límite máximo de 50 mg L^{-1} para el NO_3^- y 3 mg L^{-1} para el NO_2^- en el agua para consumo humano.

En este trabajo se utilizó la adsorción como método de tratamiento para la eliminación de nitratos y nitritos debido a su versatilidad, eficiencia, facilidad de operación y bajo coste.

Se emplearon dos arcillas precursoras, una arcilla natural (FS), una arcilla homoiónica (CP) y dos cationes de amonio cuaternario: hexadeciltrimetilamonio (HDTMA) y benciltrietilamonio (BTEA).

Como materiales adsorbentes se prepararon arcillas organofílicas obtenidas mediante la sustitución de los cationes de intercambio presentes en las arcillas precursoras por cationes: HDTMA y BTEA, en cantidades equivalentes a 1,5, 2,5 y 4,0 de la capacidad de intercambio catiónico (CEC.). Las arcillas se caracterizaron mediante difracción de rayos X, espectroscopía infrarroja y adsorción/desorción de nitrógeno.

La capacidad de adsorción se vio influenciada por 3 factores: i) la naturaleza de la arcilla precursora, ii) el tipo de catión de amonio y iii) cantidad de sal de amonio. La capacidad de adsorción de las arcillas organofílicas para ambos aniones, tuvo el siguiente orden: CP-HDTMA-4.0 > CP-HDTMA-2.5 > CP-HDTMA-1.5 > CP-BTEA-4.0 > CP-BTEA-2.5 > CP- BTEA-1.5. Otros factores fueron: pH = 4 y contenido de sal de amonio = 4.0 CEC.

Las capacidades máximas de la arcilla CP-HDTMA-4.0 para los iones nitrato y nitrito fueron de 7,23 y 0,65 mg g^{-1}, respectivamente, presentando la mayor performance en la adsorción de los aniones.

Referencias

Loganathan, P., Vigneswaran, S., y Kandasamy, J. (2013). Journal of Environmental, **131**, 363-374. https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2013.09.034

Lazaratou, C., Vayenas, D. y Papoulis, D. (2019). Applied Clay Science, **185**, 105377. https://doi.org/10.1016/j.clay.2019.105377

Síntesis De Nanocatalizadores Soportados en Òxido De Grafeno Reducido y Su Aplicación en La Producción De Diésel Renovable

Synthesis Of rGO-Supported Nanocatalysts and Their Application in Renewable Diesel Production

Mercado-Villamizar, M. F.[1], Mejía-Ospino, E.[1], Cabanzo, R.[1],

Baldovino-Medrano, V. G.[2]

[1]Laboratorio de Espectroscopía Atómica y Molecular (LEAM), Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

[2]Laboratorio de Ciencia de Superficies (SurfLab), Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

maria2238067@correo.uis.edu.co

Área temática: Química de materiales.

Palabras clave: Diésel renovable, hidrotratamiento catalítico, óxido de grafeno, catálisis heterogénea.

Las fuentes de energía fósiles son las principales promotoras de los gases efecto invernadero y sus reservas son escasas. El diésel verde o renovable es un biocombustible alterno que se produce al realizar hidrotratamiento catalítico de los ácidos grasos presentes en aceites vegetales para producir cadenas de hidrocarburos con propiedades similares al diésel de petróleo[1]. En este trabajo se estudió la actividad catalítica del cobalto y níquel soportados en óxido de grafeno reducido (Ni@rGO y Co@rGO) para la producción de diésel renovable a partir de aceite de palma. Estos catalizadores fueron seleccionados por su potencial selectividad y eficiencia en el proceso de descarboxilación de ácidos grasos. El óxido de grafeno fue preparado utilizando el método de Hummers modificado y los catalizadores se prepararon al mezclar $Ni(NO_3)_2.6H_2O$ y $CoCl_2.6H_2O$ con GO, respectivamente[2] y se utilizó como agente reductor el $NaBH_4$. La reacción se realizó en un reactor batch y se evaluaron factores como la temperatura, la concentración de los catalizadores y el tiempo de reacción. Los catalizadores fueron caracterizados por Espectroscopía Infrarrojo (FTIR), Espectroscopía Raman y Espectroscopía fotoemisión de rayos X (XPS). Mientras el diésel renovable fue caracterizado por GC-MS. Los resultados del trabajo demostraron que ambos catalizadores exhiben una alta selectividad para producir hidrocarburos C15 y C17. Los resultados de esta investigación contribuyen a los esfuerzos en curso para desarrollar combustibles diésel sostenibles y respetuosos con el medio ambiente.

Referencias

Amin, A. (2019). Review of diesel production from renewable resources: Catalysis, process kinetics and technologies. Ain Shams Engineering Journal, 10(4), 821-839.

Malinga, N. N., & Jarvis, A. L. (2020). Synthesis, characterization and magnetic properties of Ni, Co and FeCo nanoparticles on reduced graphene oxide for removal of Cr (VI). Journal of Nanostructure in Chemistry, 10, 55-68.

Evaluación Biológica De Extractos Orgánicos De *Emilia fosbergii*

Biological Evaluation Of Organic Extracts Of *Emilia fosbergii*

Bernal, M.[1,2], Chérigo, L.[1], Fernández, J.[2], Martínez-Luis, S.[2]

[1]Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Universidad de Panamá, Ciudad de Panamá, República de Panamá.

[2]Centro de Biodiversidad y Descubrimiento de Drogas, Instituto de Investigaciones Científicas y Servicios de Alta Tecnología (INDICASAT AIP), Panamá, República de Panamá.

maria.bernalr@up.ac.pa

Área Temática: Química de Productos Naturales y Farmacéuticos

Palabras clave: maleza, actividad citotóxica, actividad fitotóxica, actividad antioxidante, actividad hipoglucemiante.

Emilia fosbergii, una maleza de origen africano introducida en América Latina, que afecta particularmente a los cultivos de café, uno de los cultivos de mayor importancia económica en Panamá. Esta especie, conocida por su agresividad y capacidad para propagarse rápidamente, representa un desafío para los agricultores que buscan mantener la productividad y calidad de sus cultivos de café. Con el objetivo de identificar un potencial biológico de esta maleza asociada a los cultivos de café se planteó evaluar extractos orgánicos de *Emilia fosbergii*. La planta objeto de estudio fue recolectada en un cultivo de café ubicada en el corregimiento de Santa Clara, provincia de Chiriquí en la República de Panamá. Una vez recolectada y secada la planta se sometió a un proceso de maceración con hexano, diclorometano y metanol. Posteriormente, se evaluaron los extractos obtenidos frente a nauplios de *Artemia salina* para determinar la actividad citotóxica, se midió su actividad antioxidante mediante el ensayo con DPPH. También, se evaluó la actividad fitotóxica en semillas de *Raphanus sativus* y *Solanum lycopersicum* mediante el método del plato Petri y su capacidad inhibitoria de la enzima α-glucosidasa mediante la evaluación de la hidrólisis de PNP-G. Por último, se efectuó un análisis por Cromatografía de Gases acoplado a Espectrometría de masas de los extractos apolares para identificar los potenciales compuestos presentes, mediante el análisis de los datos obtenidos en la base de datos NIST17. Como resultados encontramos que el extracto de diclorometano presenta mayor actividad citotóxica LD50 = 158,5 ppm y actividad fitotóxica frente a las semillas de *Solanum lycopersicum*. El extracto de metanol y diclorometano presentaron actividad antioxidante moderada. El extracto de hexano tuvo actividad hipoglucemiante. Además, en el análisis de composición se identificaron algunos compuestos en el extracto de hexano como el Copaeno, D-Limoneno, Cariofileno, Tocoferol, Estigmasterol, γ-Sitosterol, entre otros.

Referencias

Peisino, M., et al. (2020). Health-promoting properties of Brazilian unconventional food plants. Waste and Biomass Valorization, 11(9), 4691–4700. https://doi.org/10.1007/s12649-019-00792-w

Freitas, J. A., Ccana-Ccapatinta, G. V., & Da Costa, F. B. (2020). Pyrrolizidine alkaloids and other constituents from Emilia fosbergii Nicolson. Biochemical Systematics and Ecology, 92(104110), 104110. https://doi.org/10.1016/j.bse.2020.104110

Análisis De Acrilamida en Café Robusta *Coffea canephora* Mediante Técnicas De Separación

Analysis Of Acrylamide in Robusta Coffee *Coffea canephora* by Sparation Techniques

Fukalova Fukalova T.[1], Paucar M.[1], Herrera M.[2,3]

Facultad de Ciencias Químicas. Grupo de investigación en Fitoquímica y Productos Biológicos (FITOQUIM), Universidad Central del Ecuador, Quito, Ecuador.

[2]Facultad de Ingeniería Química. Grupo de investigación en Moléculas y Materiales Funcionales (MoléMater), Universidad Central del Ecuador, Quito, Ecuador.

Facultad de Ingeniería Química. Grupo de investigación en Alimentos, Compuestos Orgánicos, Materiales, Microbiología aplicada y Energía (ACMME), Universidad Central del Ecuador, Quito, Ecuador.

mapaucarc2@uce.edu.ec , aleja_mp2@hotmail.com

Área Temática: Química de Alimentos.

Palabras clave: Acrilamida, Café robusta, Tiempo tostado, Tamaño partícula, *C. canephora*.

Una de las bebidas más consumidas a nivel mundial es café por su sabor, aroma y propiedades estimulantes. Sus granos se preparan con proceso de tostado durante el cual se desarrollan los aromas y sabores característicos. Los procesos térmicos en alimentos aportan propiedades organolépticas, no obstante, pueden generar subproductos no deseados de la reacción de Maillard, como acrilamida, que es considerada como un potencial cancerígeno. Debido a los efectos perjudiciales, las investigaciones en este campo deben incentivarse con el fin de poder tomar decisiones para su control en el ámbito de salud pública e inocuidad alimentaria. El estudio tuvo por objetivo evaluar la presencia de acrilamida (ACR) en café molido con diferentes tamaños de partícula.

La muestra experimental fue café de grano crudo, variedad *C. canephora* de General Villamil. Se compararon tres tiempos de tueste a temperatura constante (180°C) y distintos tamaños de partícula. Para cada factor del estudio se realizó la extracción de ACR con acetonitrilo (LiChrosol®) y ultrasonido (VWR® Ultrasonic cleaner). Se purificó con soluciones Carrez I y II y cromatografía en columna. Separación e identificación de ACR se realizó en HPTLC (Camag LINOMAT 5): estándar ACR (UltraPure™, Japón); fase estacionaria: placas de Silica gel C_{18}-50 con indicador fluorescente UV_{254}. La observación/revelado se desarrolló con lámpara UV (QINS 0003.01) de 254 nm.

La extracción de ACR se realizó con cada tamaño y cada tiempo de tueste. Elección de acetonitrilo como disolvente de extracción se basó en criterio de polaridad de ACR. El factor de retardo del estándar de ACR y las muestras presentó mejor resultado con hexano y acetato de etilo (1:5) como fase móvil. Separaciones cromatográficas presentaron distinta intensidad y discreción de bandas características a ACR en mayor tiempo de tueste.

La investigación permite concluir que cromatografía en columna es una técnica versátil que permite separación y purificación de acrilamida. Las bandas más anchas se presentaron en las muestras de mayor grado de tueste, y el tamaño de partícula no aportó interferencias en la cantidad de ACR.

Referencia

Aguilar Uscanga, B. R., Cavazos Garduño, A., Solís Pacheco, J. R., Sandoval Garcia, F., Navarro Hernández, R. E., & Serrano Niño, J. (2020). In vivo assessment of the protection conferred by β-glucans from Pleurotus ostreatus against the harmful effects of acrylamide intake (Part I). *Nutrición Hospitalaria*. https://doi.org/10.20960/nh.03001

Colmenares, J., & Vizcaya, T. (2016). Acrilamida: ¿Formación y Toxicidad En Alimentos? *Jornadas de Química, Ambiente y Sociedad, XIII*, 93–96.

Implementación De Un Método De Extracción y Cuantificación De Penicilina G y Cloxacilina en Queso y Yogurt Por Medio De CLAR con Detección UV

Implementation Of a Method For Extraction and Quantification Of Penicillin G and Cloxacillin in Cheese and Yogurt By HPLC With UV Detection

Quesada-Solano, M.[1], Fernández-Campos, A.[1,2], Cortés-Herrera, C.[3], Lamoureux-Lamontagne, G.[4]

[1]Escuela de Química de la Universidad de Costa Rica, San Pedro, San José, Costa Rica.

[2]Laboratorio de Química Analítica Aplicada, Universidad de Costa Rica, San José, Costa Rica.

[3]Centro Nacional de Ciencia y Tecnología de Alimentos (CITA), Universidad de Costa Rica, San Pedro, San José, Costa Rica.

[4]Centro de Investigaciones en Productos Naturales (CIPRONA), Universidad de Costa Rica, San Pedro, San José, Costa Rica.

melissa.quesadasolano@ucr.ac.cr

Área temática: Química de Alimentos.

Palabras clave: penicilina G, cloxacilina, queso, yogur, resistencia bacteriana.

La calidad de los alimentos que se ingiere afecta de manera directa la salud de las personas, sobre todo aquellos de origen animal, debido a que pueden existir residuos de fármacos en éstos, como antibióticos. Lo anterior puede ocasionar y agravar la problemática de la resistencia bacteriana y con ello, provocar un mayor índice de infecciones sin antibióticos que los combatan. El presente trabajo de investigación tiene como estudio la determinación de dos antibióticos betalactámicos: penicilina G y cloxacilina, en derivados lácteos, específicamente yogur y queso.

Para extraer los antibióticos se usa una serie de reactivos químicos en disolución, como: NaCl, Na_2WO_4, H_2SO_2. Se hace pasar por un Manifold con cartuchos C_{18} y se inyecta en un equipo de CLAR con detección de arreglo de diodos (DAD). El método de extracción es útil para extraer ambos antibióticos, obteniendo recuperaciones altas, con un límite de detección alrededor de 5 ppm (cuál es el de LC). Se observó que la penicilina G es inestable en medios ácidos y la cloxacilina en medios básicos, con respecto al tiempo, si se almacenan a temperaturas muy bajas, se mantienen estables por un mes.

Se usaron muestras comerciales y no se encontraron trazas de estos fármacos dado que están ausentes las señales características de los analitos. Se puede usar otro tipo de detector que sean aún más sensible, como el LC-MS, para tener un límite de cuantificación y detección más bajos.

Referencias

Luna, C., Correa, M. T., & Cedeño, H. (2006). Estudio sobre el manejo de antibióticos en hatos lecheros artesanales en Costa Rica. *Cienc. Vet. 24*(1), 91–106.

PLAN DE ACCION NACIONAL DE LUCHA CONTRA LA RESISTENCIA A LOS ANTIMICROBIANOS COSTA RICA 2018-2025. (n.d.).

Producción De Biomasa Y Evaluación De Crecimiento Celular De Microalgas Del Género *Chlorella* Y *Scenedesmus* Para Su Implementación En Ensayos Biostimulantes Ante Semillas De Referencia

Biomass Production And Evaluation Of Cell Growth Of Microalgae Of The Genus *Chlorella* And *Scenedesmus* For Implementation In Biostimulant Tests Against Reference Seeds

Miguel Vega[123], Byron Álvarez[123], Andrea Polo[123], Ariadna Batista[123], Cintia Gómez-Serrano[4], Francisco Acién[4].

[1]Escuela de Química, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad Autónoma de Chiriquí, David, Panamá.

[2]Maestría en Ciencias Químicas con Énfasis en Inocuidad Alimentaria, Facultad de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad Autónoma de Chiriquí, David, Panamá

[3]Centro de Investigación de Productos Naturales y Biotecnología, Universidad Autónoma de Chiriquí, David, Chiriquí, Panamá.

[4]Grupo de Investigación Bio173-Biotecnología De Microalgas Marinas, Universidad de Almería, Almería, España.

Miguel.vega@unachi.ac.pa

Área temática: Química Ambiental y Agrícola.

Palabras claves: bioestimulantes, biomasa, *Chlorella, Scenedesmus*, microalgas, plantas.

A nivel mundial, se buscan alternativas para reducir el uso de fertilizantes nocivos y promover una agricultura sostenible. Las microalgas pueden contribuir significativamente a este objetivo, apoyando la sostenibilidad ambiental.

En esta investigación se utilizaron las microalgas Sce Al-*Scenedesmus almeriensis, Bar1B-Scenedesmus quadricauda, Bar4-Chlorella vulgaris y Al2-Chlorella sorokiniana,* inoculadas en reactores de 300 mL con tres medios distintos (Arnon, fertilizante y drenaje). Se realizaron dos réplicas por cada microalga, manteniendo una aireación constante y un pH controlado entre 7 y 8. Se emplearon modos de operación batch y continuo, con tasas de dilución de 30% y luz de seis lámparas fluorescentes que simulaban la luz solar diaria. El crecimiento se evaluó mediante absorbancia a 680 nm y peso seco. La actividad fotosintética se midió utilizando el equipo Aquapen-C AP 110-C (PSI, República Checa). Los nitratos se analizaron mediante espectrofotometría UV utilizando Ácido Clorhídrico con lecturas a 220-275 nm, y los fosfatos se determinaron utilizando molibdato amónico con lectura a 440 nm.

El crecimiento en batch reportó valores finales de **Sce Al-Arnon:** 2.686 g/L, **Sce Al-fert:** 2.864 g/L, **Sce Al-Dren:** 3.421 g/L, **Bar1B-Arnon:** 3.319 g/L, **Bar1B-Fert:** 3.113 g/L, **Bar1B-Dren:** 4.017 g/L, **Al2-Arnon:** 0.604 g/L, **Al2-Fert:** 0.515 g/L, **Al2-Dren:** 0.512 g/L, **Bar4-Arnon:** 0.745 g/L, **Bar4-Fert:** 0.836 g/L, **Bar4-Dren:** 0.597 g/L. Los valores finales de crecimiento en sistema continuo fueron de **Sce Al-Arnon:** 1.623 g/L, **Sce Al-fert:** 1.516 g/L, **Sce Al-Dren:** 1.453 g/L, **Bar1B-Arnon:** 2.001 g/L, **Bar1B-Fert:** 1.868 g/L, **Bar1B-Dren:** 1.638 g/L, **Al2-Arnon:** 0.775 g/L, **Al2-Fert:** 0.612 g/L, **Al2-Dren:** 0.667 g/L, **Bar4-Arnon:** 1.079 g/L, **Bar4-Fert:** 0.982 g/L, **Bar4-Dren:** 0.845 g/L. Las actividades fotosintéticas para todos los ensayos se encontraron entre 0.4 y 0.7 fv/fm, La remoción de nitratos en batch fue de 80-100% y para fosfatos entre 50%-95%, en fase continua los valores de remoción de nitratos se mantuvieron entre un 79%-100% y los fosfatos reportaron un aumento entre el 65%-100%.

Los resultados obtenidos muestran que es posible producir biomasa a partir de las microalgas *Scenedesmus almeriensis* (Sce Al), *Scenedesmus quadricauda* (Bar1B), *Chlorella vulgaris* (Bar4) y *Chlorella sorokiniana* (Al2) utilizando medios nutritivos Arnon, fertilizante y drenaje.

Referencias

Alam, M. A., Wan, C., Tran, D. T., Mofijur, M., Ahmed, S. F., Mehmood, M. A., Shaik, F., Vo, D. V. N., & Xu, J. (2022). Microalgae binary culture for higher biomass production, nutrients recycling, and efficient harvesting: a review. Environmental Chemistry Letters, 20(2), 1153-1168. https://doi.org/10.1007/s10311-021-01363-z

Benner, P., Meier, L., Pfeffer, A., Krüger, K., Oropeza Vargas, J. E., & Weuster-Botz, D. (2022). Lab-scale photobioreactor systems: principles, applications, and scalability. Bioprocess and Biosystems Engineering, 45(5), 791-813. https://doi.org/10.1007/s00449-022-02711-1

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Análisis De La Variación Geográfica De Los Componentes en El Veneno Del Escorpión *Centruroides bicolor*

Analysis Of Geographic Variation Of Components in The Venom Of The Scorpion *Centruroides bicolor*

Samudio, O[1], Cleghorn, J.[2], Acosta, H.[2], Corzo, G.[3], Hernández, L[3], Salazar, M.[1, 2]

[1]Departamento de Bioquímica, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Universidad de Panamá, Ciudad de Panamá, Panamá

[2]Centro de Investigación e Información de Medicamentos y Tóxicos (CIIMET), Facultad de Medicina, Universidad Panamá, Ciudad de Panamá, Panamá

[3]Departamento de Medicina Molecular y Bioprocesos, Instituto de Biotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Cuernavaca, Morelos, México.

octavio.samudio@up.ac.pa

Área Temática: Bioquímica.

Palabras claves: *Centruroides bicolor*, electroforesis, escorpiones, HPLC.

El análisis de la variabilidad de los componentes de un veneno es de gran relevancia en la fabricación de antivenenos, pues la existencia de variaciones en la composición del veneno puede afectar la efectividad del antiveneno. Esta variabilidad en los componentes del veneno puede deberse a diferentes aspectos, entre los cuales se puede mencionar la variabilidad genética entre individuos de la misma especie, lo que puede alterar ciertos mecanismos de síntesis de toxinas, causando alteraciones en la composición del veneno. Otro factor importante es la alimentación, la dieta de un individuo tiene un impacto significativo en la composición del veneno. Esta dieta puede variar entre individuos de una misma especie que se encuentren en regiones geográficas diferentes. De igual forma, la exposición a determinados depredadores o condiciones climáticas concretas puede ocasionar respuestas adaptativas que modifiquen la composición del veneno. Este estudio se realizó utilizando la técnica de cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC) en fase reversa, la electroforesis en gel de poliacrilamida con dodecilsulfato sódico (SDS-PAGE) en condiciones reductoras y no reductoras, y la espectrometría de masas. Se observó una variación entre el veneno colectado en la región de David del colectado en las regiones de Potrerillos, Soloy, Gualaca, Cabrito y Hornito; también se observaron diferencias en las masas moleculares de algunas de las fracciones recolectadas. Estos resultados experimentales muestran una variación del veneno en su composición entre los individuos de estas regiones. En conclusión, este estudio encontró que los individuos de la especie *Centruroides bicolor* de la región de David, Chiriquí presenta diferencias en la composición de su veneno en comparación con los homólogos de otras regiones adyacentes como el Cabrito o Gualaca. Como recomendación para futuras investigaciones, es de interés ampliar el área de investigación para conocer la composición del veneno de *C. bicolor* de regiones como Veraguas, Comarca Ngäbe-Buglé e Isla Coiba, de igual forma secuenciar las toxinas purificadas para comparar su secuencia de aminoácidos.

Referencias

Escudero-Sanjur S, Castro-Pérez E, De Patino HA, Rastogi I, Ramos CW. Genetic diversity of medically important scorpions of the genus *Centruroides* (Buthidae) from Panama including two endemic species. J Genet. 2022;101:32. PMID: 35975816.

Salazar, M. H., Arenas, I., Corrales-García, L. L., Miranda, R., Vélez, S., Sánchez, J., Mendoza, K., Cleghorn, J., Zamudio, F. Z., Castillo, A., Possani, L. D., Corzo, G., & Acosta, H. (2018). Venoms of *Centruroides* and *Tityus* species from Panama and their main toxic fractions. Toxicon: official journal of the International Society on Toxinology, 141, 79–87. https://doi.org/10.1016/j.toxicon.2017.11.013

Desde El Saber Ancestral a La Constatación De La Bioactividad, Una Investigación en Dos Plantas Medicinales Nativas Del Ecuador

From Ancestral Knowledge To The Verification Of Bioactivity, an Investigation on Two Medicinal Plants Native To Ecuador

Paco Noriega[1], Alejandra de la Cruz[2], Johanna García[1]

[1]Maestría en Productos Farmacéuticos Naturales, Universidad Politécnica Salesiana, Av 12 de octubre N2422 y Wilson. Quito Ecuador

[2] Carrera de Biotecnología, Universidad Politécnica Salesiana, vía a la Costa SN, Guayaquil Ecuador.

pnoriega@ups.edu.ec

Área Temática: Productos Naturales.

Palabras clave: *Dalea coerulea*, *Piper barbatum*, Actividad antimicrobiana, Actividad antiinflamatoria, Saber ancestral.

El uso de las plantas medicinales por parte de los pueblos ancestrales es algo común en la región de los Andes Ecuatorianos, son muchos las investigaciones etnobotánicas realizadas en los últimos años, sin embargo, los trabajos de investigación que comprueban dicha bioactividad son escasos. Una investigación etnobotánica del año 2018, en las cercanías de Quito, puso en evidencia que en algunas plantas medicinales los estudios eran nulos o escasos, de manera especial en dos especies: *Dalea coerulea* y *Piper barbatum*.

Fueron usadas las partes aéreas de *D. coerulea*, que son utilizadas para afecciones del sistema respiratorio y las hojas de *P. barbatum*, empleadas para infecciones de las vías urinarias. Fueron testadas varias cepas antimicrobianas con códigos ATTC.

De las hojas de ambas especies se extrajeron los aceites esenciales mediante hidrodestilación y su composición química fue analizada por GC/FID y GC/MS. La actividad antimicrobiana fue evaluada por la metodología de la micro dilución en placas. En *D. coerulea* en los cuales también se determinó la concentración de polifenoles y flavonoides.

Con el fin de evidenciar la actividad antiinflamatoria en *D. coerulea*, se emplearon metodologías In vivo e In vitro.

En el aceite de *P. barbatum* es destacable la actividad antimicrobiana de varios sesquiterpenos hidroxilados, mientras que en *D. coerulea* las moléculas mayoritarias son α y β pinenos. En cepas analizadas es interesante el apreciar, valores de concentración mínima inhibitoria inferiores a los 500 µg/mL, observándose una muy elevada actividad. Los extractos y el aceite de *D. coerulea*, muestran una actividad antinflamatoria cercana al control positivo (diclofenaco).

Los resultados tanto en la química como en actividad biológica de estas dos plantas andinas demuestran que el uso tradicional de las mismas se logró corroborar con ensayos experimentales.

El cuidado y preservación tanto del saber ancestral como de la biodiversidad se vuelven prioritarios, los espacios naturales en Latinoamérica mantienen aún muchas especies que pueden proporcionar nuevas moléculas y medicamentos para el beneficio de la salud de las personas.

La Enseñanza De La Química Orgánica a Nivel Postsecundario Universitario Desde La Innovación Curricular: Una Reflexión Fenomenológica Desde La Òptica De Los Profesores Universitarios

The Teaching Of Organic Chemistry At The Post-secondary University Through Curricular Innovation: a Phenomenological Reflection From The Perspective Of University Professors

Soler, R. [1], **Huertas, Y.** [1], **Hernández, E.** [1], **León, M. S.** [1]

[1]Caribbean University. Bayamón, Puerto Rico

rsoler@caribbean.edu

Área Temática: Enseñanza de la Química.

Palabras clave: Química orgánica, enseñanza, innovación curricular, estrategias, modelo de adopción curricular.

La enseñanza de la química orgánica del siglo XXI se encuentra en una crisis según las investigaciones y entrevistas realizadas por Halford. Ante esta situación es necesario que los trasformar los procesos de enseñanza. Para asi atender las necesidades e intereses de los estudiantes del siglo XXI. Para ello es necesario que los profesores trasformen de manera práctica las clases de química orgánica. De tal manera puedan los estudiantes empoderarse del contenido de química orgánica según expone Garg (2019). Para enfocarse al estudiante en la búsqueda de resolución de problemas y que la clase no sea una de memorización exhaustiva y abstracta.

La metodología fue una cualitativa con el diseño fenomenológico. En donde se entrevistaron diez sujetos que eran profesores universitarios. En que se utilizaron preguntas guías durante las entrevistas realizadas. La información obtenida fue analizada mediante el método Wolcott y se organizaron en cuatro categorías. Las categorías fueron las siguientes: conceptos y aspectos generales para innovar, proceso para innovar desde la óptica del profesor, estrategias para innovar en química orgánica y la de retos y desafíos al innovar en química orgánica.

Entre los hallazgos obtenidos en la investigación se evidencio que los diez sujetos fueron agentes de cambio y transformadores en las clases y laboratorios de química orgánica. A través de los diez sujetos se identificaron varias estrategias educativas que fueron utilizadas mediante la innovación curricular. También se identificaron para que se dé la innovacion curricular en la clase o laboratorio debe darse mediante un proceso gradual, continuo, flexible y dinámico. Por último, las aportaciones que tuvo la investigación fueron en recopilar información relevante en cuanto a las razones y preocupaciones de los profesores que tuvieron que recurrir a la innovacion curricular en la clase de química orgánica. Además, contribuyó a identificar estrategias educativas, conocer los elementos que propiciaron la innovacion curricular. Entre estas se observó que al innovar se logró que los estudiantes mejorarán su rendimiento académico en la clase de química orgánica.

Referencias

Garg, N. K. (2019). How organic chemistry became one of UCLA's most popular classes. Journal of Biological. Chemistry, 294(46) 17678 –17683.

https://doi.org/10.1074/jbc.AW119.008141Serdyukov, P. (2017). Innovation in education: What works, what doesn't, and what to do about it? *Journal of Research in Innovative Teaching & Learning, 10*(1), 4-33. https://doi.org/10.1108/JRIT-10-2016-0007

Sukmawati, W. (2020). Techniques adopted in teaching students' organic chemistry course for several years. *Journal Inovasi Pendidikan IPA, 6*(2), 247.

https://doi.org/10.21831/jipi.v6i2.38094

Optimización De Proceso Foto-Electro Fenton Solar Para La Degradación De Contaminantes De Preocupación Emergente y Desinfección De Efluentes De Plantas De Tratamiento De Aguas Residuales

Optimization Of Solar Photo-Electro Fenton Process For Degradation Of Contaminants Of Emerging Concern and Disinfection Of Wastewater Treatment Plant Effluents

R. Salazar-González[1], J. Herrera-Muñoz [2], S. Miralles Cuevas [3], S.Piña[2], A. Cabrera Reina[3]

[1]Grupo de Investigación de Análisis, Tratamiento, Electroquímica, Recuperación y Reúso de Agua (WATER[2]), Escuela de Química, Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile.

[2]Facultad de Química y Biología, Universidad de Santiago de Chile, Santiago, Chile.

[3]Instituto Universitario de Investigación y Desarrollo Tecnológico (IDT), Universidad Tecnológica Metropolitana, Ignacio Valdivieso 2409, San Joaquín, Santiago, Chile.

ricardo.salazar@uc.cl

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola.

Palabras claves: Procesos avanzados de oxidación, Contaminantes emergentes.

Los contaminantes de preocupación emergente (CECs) en efluentes de plantas de tratamiento de agua residual (PTAR) no son eliminados adecuadamente y terminan en cuerpos de agua. Los procesos avanzados de oxidación son una alternativa crucial para mejorar la calidad del agua, dado que las PTAR no están diseñadas para estos contaminantes. Con base en esto se estudió la aplicación del proceso foto-electro Fenton solar (FEFS) para la degradación de CECs e inactivación de microorganismos en efluentes secundarios de PTAR.

Este proceso se estudió en un reactor Solar Electrochemical - Raceway Pond (SEC-RPR) de 20 L, compuesto por un RPR y una celda electroquímica de filtro prensa conectada por una bomba peristáltica. La electrólisis se llevó a cabo con una densidad de corriente constante, usando un ánodo de óxidos metálicos mixtos y un cátodo de difusión de aire para generar H_2O_2. Las concentraciones de CECs (acetaminofén, cafeína, sulfametazina y sulfametoxazol) y del complejo Fe^{3+}-EDDS se determinaron mediante HPLC-DAD. La concentración de H_2O_2 se siguió por espectrofotometría UV-Visible. Para este estudio, se optimizaron la densidad de corriente, la concentración del complejo Fe^{3+}-EDDS y el tiempo de incorporación del complejo al proceso FEFS, utilizando un modelo de superficie de respuesta. El experimento se realizó en un efluente secundario simulado de PTAR, enriquecido con 800 µg/L de CECs.

Las condiciones óptimas determinadas fueron una densidad de corriente de 24,6 mA/cm^2, una concentración de Fe^{3+}-EDDS de 0,089 mM, incorporado a los 3,8 minutos de iniciado el proceso FEFS. Estas condiciones, validadas experimentalmente y aplicadas a un efluente secundario real, lograron degradar más del 80% de los cuatro contaminantes en 30 minutos y desinfectar el efluente en 75 minutos. Esto permite aplicar el proceso FEFS a pH natural en un SEC-RPR para producir agua de alta calidad con baja concentración de CECs, adecuada para su reutilización segura en diversas actividades económicas.

Referencias

Rivas Ibáñez, G., Bittner, M., Toušová, Z., Campos-Mañas, M. C., Agüera, A., Casas López, J. L., Sánchez Pérez, J. A., & Hilscherová, K. (2017). Does micropollutant removal by solar photo-Fenton reduce ecotoxicity in municipal wastewater? A comprehensive study at pilot scale open reactors. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, *92*(8), 2114–2122. https://doi.org/10.1002/jctb.5212

Transducción Audible Del Espectro Infrarrojo: Explorando La Síntesis Sónica De Vibraciones Moleculares

Audible Transduction Of Infrared Spectra: Exploring The Sonic Synthesis Of Molecular Vibrations

Romel S. Guañuna[1], Alexis F. Fernández[1], Edwin J. Naula[1], Thibault Terencio[1,2].

[1]Escuela de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad de Investigación de Tecnología Experimental Yachay Tech, Urcuquí, Ecuador.

[2]Grupo de Investigación CATS (CAtalysis Theory & Spectroscopy), Universidad de Investigación de Tecnología Experimental Yachay Tech, Urcuquí, Ecuador.

romel.guanuna@yachaytech.edu.ec

Área Temática: Química Teórica y Computacional.

Palabras clave: Espectro Infrarrojo (IR), Vibraciones Moleculares, Sonido, Python Software, ORCA Software.

La interacción luz-materia es fundamental en la química analítica, especialmente en la espectroscopia infrarroja (IR), utilizada para identificar grupos funcionales mediante la vibración de enlaces moleculares a diferentes longitudes de onda, resultando en un espectro característico. Más y más, se buscó formas alternativas de interpretar tal espectro, y la idea de cambiar de enfoque ha captado la atención de muchos investigadores. Del otro lado, esta búsqueda está limitado por la recolección de datos experimentales, pero se puede superar explorando masivamente a través de simulaciones IR en química teórica.

En este trabajo, se presenta un método general para cambiar desde la percepción visual a auditiva en la espectroscopia: 1) El uso del programa Avogadro permitió diseñar moléculas, pre-optimizar su geometría y generar el archivo de entrada para ORCA. 2) Se modificó el archivo de entrada con B3LYP OPT FREQ y se ejecutó con ORCA v4,21.2. desde la terminal, para obtener el archivo de salida con datos de frecuencias vibracionales. 3) A partir de estos datos, se realiza una transducción de frecuencias para obtener sonido audible. Se utilizo un script de Python con las librerías Pandas, Numpy y Scipy, permitiendo la extrapolación y suavizado de los datos, que luego se traducen y se analizan con la librería Mido, para generar archivos de audio MIDI que representen las vibraciones moleculares.

Mediante este método, se exploraron diversas clases químicas, incluyendo dopamina y serotonina, moléculas similares en estructura y grupos químicos. Los sonidos resultantes de moléculas químicamente diferentes son distintivos y fácilmente identificables, mientras que los sonidos de dopamina y serotonina, aunque similares, son distinguibles, destacando una característica firma auditiva derivada de las vibraciones de sus grupos funcionales.

La implementación de música para interpretar las vibraciones moleculares es un método original que permite potencialmente acelerar la identificación. Más allá de su impacto científico, esta integración musical promueve el interés de las generaciones más jóvenes en la química y facilita la inclusión de estudiantes con discapacidades visuales en la educación química. Este enfoque holístico no solo amplía nuestra comprensión de las vibraciones moleculares, sino que también promueve un método pedagógico innovador.

Referencias

Garrido, N., Pitto-Barry, A., Soldevila-Barreda, J. J., Lupan, A., Boyes, L. C., Martin, W. H. C., & Barry, N. P. E. (2020). The Sound of Chemistry: Translating Infrared Wavenumbers into Musical Notes. *Journal of Chemical Education*, *97*(3), 703–709. https://doi.org/10.1021/ACS.JCHEMED.9B00775/ASSET/IMAGES/MEDIUM/ED9B00775_0004.GIF

Neese, F. (2012). The ORCA program system. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, *2*(1), 73–78. https://doi.org/10.1002/wcms.81

Diseño De Péptidos Derivados De La Proteína ACE2 Capaces De Neutralizar Pseudovirus De SARS-Cov-2 Mediante Aglutinación

Design Of Peptides Derived From The ACE2 Protein Capable Of Neutralizing SARS-Cov-2 Pseudovirus Through Agglutination

Sara Catalina Nieto Rincón[1], Mauricio Urquiza Martínez[1], Fanny Guzmán[2]

[1]Grupo de Investigación en Hormonas, Universidad Nacional de Colombia, sede Bogotá, Colombia

[2]Nucleo de Biotecnología Curauma, Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile

sanietor@unal.edu.co

Área Temática: Bioquímica.

Palabras clave: helicidad, proteína "spike ", fluorescencia, proteína verde fluorescente, afinidad.

El proceso de infección del SARS-CoV-2 en las células humanas es facilitado por la glicoproteína "spike", que se une a la proteína ACE2 en la superficie celular. Las mutaciones en la "spike" aumentan su afinidad por ACE2, favoreciendo la entrada viral y su replicación (Thakur et al 2023). Este estudio se centra en diseñar péptidos derivados del dominio de unión al receptor ACE2 con la proteína "spike" y evaluar su capacidad para inhibir esta unión en nanopartículas pseudovirales de SARS-CoV-2, proponiendo una nueva estrategia antiviral.

Los péptidos fueron diseñados in silico, y los 11 con mayor porcentaje de alfa hélice, según el programa AGADIR, se sintetizaron mediante la metodología de bolsas de té con F-MOC. Fueron purificados por HPLC y liofilizados, y cuatro de las secuencias se marcaron con rodamina. Las nanopartículas pseudovirales se produjeron en células HEK 293T transfectadas con tres plásmidos: uno para la proteína "spike" (Addgene plasmid #155297), uno para la proteína verde fluorescente (Addgene plasmid #12257) y uno para el vector de empaquetamiento (Addgene plasmid #17531).

La caracterización de los péptidos se realizó mediante espectrometría de masas, dicroísmo circular y espectroscopía de fluorescencia (Varioskan Lux ThermoFisher). Las nanopartículas pseudovirales se caracterizaron mediante microscopía de fluorescencia (Invitrogen™ EVOS™ M5000), DLS (nanoPartica SZ-100V2 Series, HORIBA, Ltd) y espectroscopía de fluorescencia. En los ensayos de unión se empleó el péptido a 6,0 μM con diluciones de sobrenadante que contenía nanopartículas pseudovirales, sembrando por triplicado en una caja de 96 pozos de fluorescencia y leyendo con un lector de microplacas de fluorescencia (FLUOstar® Omega, BMG LABTECH) (Excitación: 485 nm, Emisión: 520 nm) o por DLS.

Los resultados mostraron que los péptidos diseñados tenían masas de 2393,77 a 2720,19 Da y un alto porcentaje de alfa hélice, que varía entre 14,1% y 56,9%. Las nanopartículas pseudovirales de SARS-CoV-2 producidas tenían un diámetro de partícula de 100 nm. Las constantes de afinidad obtenidas variaron de 0,023 U.A a 0,032 U.A. Los ensayos de unión realizados con DLS mostraron un incremento en el tamaño de las partículas, cuando los péptidos interactuaban con las nanopartículas pseudovirales, sugiriendo un proceso de aglutinación.

Referencias

Scialo, F., Daniele, A., Amato, F., Pastore, L., Matera, M. G., Cazzola, M., ... & Bianco, A. (2020). ACE2: the major cell entry receptor for SARS-CoV-2. *Lung*, *198*, 867-877.

Thakur, S., Verma, R. K., Kepp, K. P., & Mehra, R. (2023). Modelling SARS-CoV-2 spike-protein mutation effects on ACE2 binding. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, *119*, 108379.

Desarrollo y Síntesis De Un Análogo De Los Quimioterapéuticos Inhibidores De La Topoisomerasa I, Por Metodologías De Cribado Virtual Basadas en Cambios Bioisoestéricos y QSAR

Development and Synthesis Of An Analogue Of Topoisomerase I Inhibitor Chemotherapeutics Through Virtual Screening Methodologies Based On Bioisosteric Changes and QSAR

Rodríguez, S. [1], Moreno, J.[1], Fonseca, V.[1], Guevara, J.[1*]

[1]Grupo de investigación en química Aplicada (INQA), Facultad de Química, Universidad El Bosque, Bogotá, Colombia.

sdrodriguezv@unbosque.edu.co,jpmorenot@unbosque.edu.co, avfonseca@unbosque.edu.co, *joguevara@unbosque.edu.co.

Área Temática: Química de Productos Naturales y Farmacéuticos.

Palabras clave: ADN topoisomerasa 1, quimioterapéutico, cáncer, QSAR.

La prevalencia del cáncer ha experimentado un aumento significativo en los últimos años, mostrando altas tasas de morbilidad y mortalidad, representando un problema de salud pública a nivel mundial (OMS, 2020). Así mismo, según la Organización Panamericana de la Salud se estima que la carga de cáncer aumentará en un 60% lo que significa que para el 2040 se prevén aproximadamente 6,23 millones de personas diagnosticadas con esta patología. Esto se debe, en gran parte a la complejidad de la enfermedad, que conlleva a diagnósticos tardíos y fallas en los tratamientos empleados en la actualidad. En consecuencia, los pacientes con cáncer son sometidos a tratamientos con múltiples eventos adversos asociados a los mecanismos de acción de los fármacos empleados, los cuales presentan baja selectividad por su blanco terapéutico.

Un ejemplo de lo anterior, son los inhibidores de la ADN topoisomerasa I, esta, corresponde a fármacos destinados para el tratamiento de diversos tipos de cáncer. Estos fármacos presentan eventos adversos causados por su alta toxicidad, esto impacta en la adherencia de los tratamientos, ya que se presenta hipertensión arterial, insuficiencia cardiaca, diarrea, alopecia, náuseas y el más representativo, mielosupresión.

Es por ello por lo que se plantea la búsqueda de un nuevo análogo inhibidor de la ADN topoisomerasa I, mediante el diseño racional aplicando metodologías QSAR basadas machine learning, finalmente se diseña la síntesis del análogo y caracterización. A partir de la investigación se plantearon tres modelos predictivos basados en tres líneas celulares de cáncer colorrectal (HCT-116, HT-29, HCT-8) con estos modelos se diseñaron 59 análogos y se seleccionaron A12 y A39, los cuales presentaron mejores atributos farmacológicos comparados con Irinotecan, Topotecan y Doxorubicina éstas mejoras incluyen, alta afinidad por la ADN topoisomerasa 1 (A12 6,8 y A39 7,9 Kcal/mol) y bajos valores de IC50 A12 (0,23 µM en HCT-116) y A39 (0,21 µM en HCT-8 y menor porcentaje de unión a proteínas PPB, para A12 (89,6%) y A39 (91,9%). Con base en estos resultados, se sugiere que los análogos A12 y A39 tienen el potencial de ser nuevos inhibidores de topoisomerasa 1.

Referencias

Caballero C (2019). Toxicidad de los tratamientos oncológicos. SOCIEDAD ESPAÑOLA DE ONCOLOGÍA MÉDICA. Recuperado de https://seom.org/guia-actualizada-de-tratamientos/toxicidad-de-los-tratamientos-oncologicos.

Organización Mundia de la salud (2020). Cáncer. Recuperado de https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/cancer.

Organización Panamericana de la salud (2023) . Cáncer . Recuperado de https://www.paho.org/es/campanas/dia-mundial-contra-cancer-2023-por-unos-cuidados-mas-justos

Identificación De Compuestos Orgánicos Volátiles De *Mora oleifera*

Identification Of Volatile Organic Compounds Of *Mora oleifera*

Martínez-Luis, S.[1], Fernández, J.[1], Chérigo, L.[2]

[1]Centro de Biodiversidad y Descubrimiento de Drogas, INDICASAT AIP, Panamá, Panamá. [2]Departamento de Química Orgánica, Escuela de Química, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

smartinez@indicasat.org.pa

Área Temática: Química de Productos Naturales.

Mora oleífera es una planta de manglar que se encuentra en la condición vulnerable según la Lista Roja de Especies Amenazadas de la Unión Internacional para la Conservación de la Naturaleza (UICN). *M. oleifera* es un árbol alto que crece entre 15 y 45 metros de altura, cuya madera es de alta calidad y es utilizada como material de construcción. Curiosamente, no hay información sobre usos medicinal y mucho menos sobre los metabolitos secundarios que produce. Para tener una idea sobre estos aspectos este trabajo tuvo como objetivo principal identificar los metabolitos secundarios volátiles biosintetizados por esta planta y correlacionarlos sus propiedades medicinales reportadas. Para este propósito realizamos un análisis metabolómico de las fracciones de *M. oleífera* mediante Cromatografía de Gases acoplado con Espectrometría de masas, que nos permite obtener una amplia información sobre los compuestos de esta planta. Además, también realizamos un análisis metabolómico detallado mediante la generación de redes moleculares con GNPS (Global Natural Products Social Molecular Networking), plataforma que nos aporta información valiosa sobre la diversidad química y las relaciones entre moléculas. en un conjunto de datos dado.

Las hojas de *M. oleífera* se colectaron en la Provincia de Chiriquí, Panamá y con ellas se prepararon tres fracciones con incremento de polaridad (Hexano, diclorometano y Metanol), para facilitar el análisis. Posteriormente, se realizó el análisis mediante Cromatografía de Gases acoplado a Espectrometría de Masas de cada fracción en las condiciones que permitieron la mejor separación cromatográfica. Para la identificación de los compuestos se analizaron los datos obtenidos en la base de datos NIST20 generando una lista de compuestos de acuerdo a su porcentaje de identidad. También se empleó el protocolo de la herramienta GNPS para generar las redes de compuestos. Como resultado se logró identificar 44 compuestos con un porcentaje de identidad mayor al 90%, lo que proporcionó información novedosa sobre la composición química de esta planta. Además, con la herramienta GNPS se generaron las diferentes redes de grupos de compuestos en función de sus similitudes y patrones de fragmentación, revelando que existen familias de compuestos pertenecientes a los triterpenos, esteroles, ácidos grasos y compuestos aromáticos simples.

Estudio Químico Biodirigido De La Planta De Manglar *Mora oleifera*

Bioguided Chemical Study Of The Mangrove Plant *Mora oleifera*

Martínez-Luis, S.[1], Fernández, J.[1], Chérigo, L.[2]

[1]Centro de Biodiversidad y Descubrimiento de Drogas, INDICASAT AIP, Panamá, Panamá. [2]Departamento de Química Orgánica, Escuela de Química, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

smartinez@indicasat.org.pa

Área Temática: Química de Productos Naturales.

Los estudios destinados a revelar el potencial de la bioactividad de plantas de manglar han generado resultados prometedores, ya que estos no solo han revelado la capacidad de los manglares para producir compuestos bioactivos en diversos blancos biológicos, sino que han destacado su gran potencial como fuente productora de diversos compuestos naturales, incluyendo esteroides, triterpenos, saponinas, flavonoides, alcaloides y taninos.

Panamá tiene una extensa área de manglares y es uno de los países más biodiversos de América. Si bien las plantas de manglar se han utilizado durante mucho tiempo en la medicina tradicional en diversos países, aún se desconocen las aplicaciones medicinales de las especies existentes en Panamá. Por otro lado, existen varias especies de manglares amenazadas por lo que hay una urgente necesidad de estudiarlas ante un potencial riesgo de perderlas sin saber que beneficios podrían aportar.

Así, el presente estudio tuvo como objetivo realizar un estudio químico biodirigido para obtener compuestos bioactivos de *Mora oleífera*, ya que esta especie no cuenta con reportes sobre los metabolitos secundarios que produce y mucho menos sobre sus potenciales bioactividades. Para esta investigación se utilizaron las técnicas convencionales destinadas a estudios de productos naturales, y mediante un fraccionamiento guiado por bioensayos del extracto crudo, se pudieron aislar siete compuestos activos contra la enzima α-glucosidasa, que fueron identificados como lupenona (1), lupeol (2), α-amirina (3), β-amirina (4), ácido palmítico (5), sitosterol (6) y estigmasterol (7).

Las estructuras de los compuestos se determinaron mediante análisis espectroscópicos, incluidos APCI-HR-MS y RMN. Los compuestos 1-7 mostraron una inhibición dependiente de la concentración de la enzima α-glucosidasa, con valores de CI_{50} de 0,72, 1,05, 2,13, 1,22, 240,20, 18,70 y 163,10 μM, respectivamente. El análisis cinético reveló que todos los compuestos actuaron como inhibidores competitivos de la enzima. Finalmente, un análisis de acoplamiento molecular predijo que todos los triterpenos se unían al mismo sitio que la acarbosa en la α-glucosidasa intestinal humana (PDB: 3TOP). Estos hallazgos sugieren que *M. oleifera* tiene el potencial de ser una valiosa fuente botánica para el desarrollo de compuestos para el manejo de los niveles de azúcar en sangre en personas con diabetes.

Diseño y Caracterización De Un Péptido Quimérico Con Potencial Actividad Antiproliferativa, Evaluado En Líneas Celulares De cáncer Que Expresan La integrina αvβ6

Design and Characterization Of a Chimeric Peptide With Potential Antiproliferative Activity, Evaluated in Cancer Cell Lines Expressing The Integrin αvβ6.

Jiménez, S.[1], Urquiza, M.[1], Benavides, D.[1], Guzman, F[2].

[1]Grupo de Investigación en Hormonas. Departamento de Química. Facultad de Ciencias. Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá.

[2]Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile

snjimenezca@unal.edu.co

Área Temática: Bioquímica.

Palabras clave: integrinas, cáncer, péptidos antitumorales, NFκB.

Las integrinas son receptores transmembrana involucrados en diferentes vías de señalización asociadas con la proliferación, adhesión, migración, diferenciación y sobrevivencia celular; una sobreexpresión de las integrinas se puede asociar a diferentes enfermedades como el cáncer. La integrina αvβ6 está sobre-regulada durante los procesos de embriogénesis y carcinogénesis. Un alto nivel de expresión de la integrina αvβ6 es un indicador pronóstico de pacientes con cáncer gástrico, cervical, mama, cuello uterino, cáncer de pulmón, etc., Trabajar con moléculas que puedan unirse específicamente a esta integrina puede ser muy importante para la detección, diagnóstico y tratamiento.

Se realizó el diseño, utilizando PyMOL, de dos péptidos quiméricos, con un motivo de unión a la integrina αvβ6 y uno con un dominio de inactivación del Factor Nuclear κappa Beta (NFκB), el otro con un péptido mimético de BCL-3. Se caracterizaron mediante HPLC y UV-Vis y se evaluó la afinidad del péptido de unión a la integrina mediante fluorescencia y microscopía, donde se encontró que dicha molécula es específica, a una concentración de 54,2 µM, para células cancerosas y se sugiere que puede estar ingresando al núcleo de la célula. Se realizaron ensayos de viabilidad celular empleando Rojo Neutro, observando un efecto directo de las quimeras, disminuyendo la proliferación de las líneas celulares MCF7 y HeLa a diferencia de la línea celular no cancerosa, HEK293T, lo cual se reforzó al realizar un ensayo preliminar de PCR empleando primers específicos para BAX y BCL2 observando una relación superior a 1 para el tratamiento con uno de los péptidos quiméricos en MCF7, lo que confirmó que sí existió una afectación sobre la viabilidad celular sugiriendo la activación de la vía de apoptosis.

Referencias

Urquiza, M., Benavides-Rubio, D., & Jimenez-Camacho, S. (2023). Structural analysis of peptide binding to integrins for cancer detection and treatment. Biophysical Reviews, 15(4), 699–708. https://doi.org/10.1007/s12551-023-01084-3

Collins, P. E., Grassia, G., Colleran, A., Kiely, P. A., Ialenti, A., Maffia, P., & Carmody, R. J. (2015). Mapping the interaction of B cell leukemia 3 (BCL-3) and nuclear factor κB (NF-κB) p50 identifies a BCL-3-mimetic anti-inflammatory peptide. The Journal of Biological Chemistry, 290(25), 15687–15696. https://doi.org/10.1074/jbc.m115.643700

Integración De Exfoliación y Propiedades De Inmunoafinidad en Nanotubos De Carbono De Paredes Múltiples Mediante Funcionalización No Covalente Con Inmunoglobulina G Humana.

Integrating Exfoliation and Immunoaffinity Properties in Multi-Walled Carbon Nanotubes By Non-covalent Functionalization With Human Immunoglobulin G

López-Mujica, M.[1], Tamborelli, A. [1,2], Vaschetti, V.M.[2], Espinoza, L.C.[3], Dalmasso, P.R.[2], Rivas, G.A.[1], Bollo, S. [3]

[1]Departamento de Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina

[2]Departamento de Ingeniería Química, Facultad Regional Córdoba, Universidad Tecnológica Nacional, Argentina

[3]Departamento de Química Farmacológica y Toxicológica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile.

sbollo@ciq.uchile.cl

Área Temática: Química Analítica.

Palabras Claves: Nanotubos de carbono funcionalizados, Sensor Electroquímico, Inmunosensor Impedimétrico, Ácido Úrico.

El desarrollo de plataformas (bio)sensoras con un rendimiento analítico mejorado es uno de los desafíos actuales en el campo de los sensores electroquímicos. Los nanomateriales han surgido como componentes únicos de sensores electroquímicos avanzados, participando en la construcción de la capa de reconocimiento y/o en el evento de transducción. En este contexto, los nanotubos de carbono (CNTs) han demostrado ser un material excelente para el desarrollo de (bio)sensores electroquímicos innovadores y versátiles.

En este trabajo se presenta una estrategia innovadora para exfoliar simultáneamente nanotubos de carbono de paredes múltiples (MWCNTs) y generar MWCNTs con propiedades de inmunoafinidad. Esta estrategia se basa en la funcionalización no covalente de MWCNTs con inmunoglobulina G humana (IgG) mediante sonicación de 2.5 mg/mL de MWCNTs en 2.0 mg/mL de IgG durante 15 minutos en un baño de sonicación.

Los experimentos impedimétricos realizados en electrodos de carbono vítreo (GCE) modificados con el nanohíbrido resultante de MWCNT-IgG en presencia del anticuerpo anti-inmunoglobulina G humana (Anti-IgG) demostraron que la inmunoglobulina retiene sus propiedades de bioreconocimiento incluso después del tratamiento durante la funcionalización de los MWCNT.

e propusieron, como prueba de concepto, dos sensores electroquímicos modelo: uno voltamétrico para la cuantificación de ácido úrico aprovechando la electroactividad de los MWCNT exfoliados (rango lineal, 5.0×10^{-7} M - 5.0×10^{-6} M; límite de detección, 165 nM) y un inmunosensor impedimétrico para la detección de Anti-IgG mediante el uso de las propiedades de bioafinidad de la IgG presente en el nanohíbrido (rango lineal, 5-50 µg/mL; límite de detección, 2 µg/mL).

Referencias

Microchimica Acta (2023) 190:73 https://doi.org/10.1007/s00604-022-05630-w

Sens. Actuators B Chem 357:131304. https://doi.org/10.1016/j.snb.2021.131304

La Química En La Cocina: Una Estrategia Innovadora Para El Aprendizaje De La Química

Chemistry in The Kitchen: An Innovative Educational Strategy For Learning Chemistry

Adorno, V[1].

[1]Caribbean University

vadorno@caribbean.edu

Área Temática: Enseñanza de la Química.

Palabras clave: **Química en la educación, Estrategias educativas, Cocina y química, Aprendizaje práctico, Reacciones químicas en alimentos.**

La enseñanza de la química puede beneficiarse enormemente de la integración de contextos prácticos y cotidianos. La cocina, como un entorno donde ocurren numerosas reacciones químicas, ofrece una oportunidad única para enseñar conceptos químicos de manera práctica y atractiva. Esta presentación explora cómo utilizar la cocina como una herramienta pedagógica para mejorar el aprendizaje de la química.

Materiales

Libros y estudios científicos:

- "Teaching Chemistry with Food: Experiments and Activities for the Classroom" by Andy Brunning
- "The Kitchen as a Laboratory: Reflections on the Science of Food and Cooking" edited by César Vega, Job Ubbink, and Erik van der Linden
- "Cooking Up Chemistry: Food as a Teaching Tool" by John E. Hodge
- "Food Chemistry Experiments: Hands-on Learning for Science Education" by Patricia T. Crissey
- "Chemistry in the Kitchen: Understanding Cooking Chemistry through Experimentation" by Robert Wolke

Instrumentos de cocina y laboratorio:

- Sartenes, ollas, y utensilios de cocina
- Termómetros de cocina
- Balanza de precisión
- Equipos de laboratorio básicos (pH metros, tubos de ensayo, etc.)

Se realizó un análisis exhaustivo de estudios y libros relevantes que exploran el uso de la cocina como herramienta educativa para la enseñanza de la química. Basándose en la revisión bibliográfica, se diseñaron y desarrollaron experimentos culinarios específicos para ilustrar conceptos químicos básicos. Estos experimentos se seleccionaron y estructuraron para ser implementados en un entorno educativo, asegurando que fueran tanto prácticos como relevantes para los estudiantes. Para evaluar la efectividad de la cocina como herramienta educativa en la enseñanza de la química, se adoptó una metodología de investigación basada en evidencia.

Las actividades culinarias educativas resultaron en un aumento significativo en el interés y la comprensión de los conceptos químicos entre los estudiantes. Los experimentos de cocina permitieron a los estudiantes visualizar y aplicar teorías químicas en un contexto real, mejorando su retención y habilidades prácticas.

Los hallazgos indican que la cocina es una herramienta eficaz para la enseñanza de la química. La familiaridad y el interés innato en la comida facilitan el aprendizaje y hacen que los conceptos químicos sean más accesibles y relevantes. Se discutirán las implicaciones para el currículo educativo y cómo esta metodología puede ser implementada en diferentes niveles educativos.

Integrar la cocina en la enseñanza de la química no solo enriquece el proceso de aprendizaje, sino que también aumenta el interés y la comprensión de los estudiantes. Esta estrategia educativa práctica puede transformar la manera en que se enseña la química, conectando la teoría con la vida cotidiana de los estudiantes.

Referencias

Brunning, A. (2020). *Teaching Chemistry with Food: Experiments and Activities for the Classroom*. Royal Society of Chemistry.

Crissey, P. T. (2008). *Food Chemistry Experiments: Hands-on Learning for Science Education*. Kendall Hunt Publishing.

Hodge, J. E. (2004). *Cooking Up Chemistry: Food as a Teaching Tool*. Journal of Chemical Education, 81(10), 1530-1536.

Vega, C., Ubbink, J., & van der Linden, E. (Eds.). (2012). *The Kitchen as a Laboratory: Reflections on the Science of Food and Cooking*. Columbia University Press.

Wolke, R. (2002). *Chemistry in the Kitchen: Understanding Cooking Chemistry through Experimentation*. Dover Publications.

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Actividad Fotocatalítica De Películas De Zno Co-Dopadas Con Co Y Cu

Photocatalytic Activity Of Zno Thin Films Codoped With Co And Cu

Vallejo, W. Diaz-Uribe, C. Cantillo, A[1].

[1]Grupo de Investigación en Fotoquímica y Fotobiología, Universidad del Atlántico, Barranquilla, Colombia.

williamvallejo@mail.uniatlantico.edu.co

Área Temática: **Química Física.**

Palabras clave: Antioxidantes, estrés oxidativo, estado estacionario, oxígeno singulete.

Uno de los grandes retos que enfrenta nuestra sociedad a mediano plazo está relacionado con el acceso a fuentes de agua limpias para el consumo humano. La fotocatálisis heterogénea es una tecnología que ofrece la oportunidad de utilizar la energía solar como fuente primaria de energía para iniciar los procesos de remoción de contaminantes recalcitrantes de las fuentes hídricas.[1] En este trabajo se sintetizaron películas de ZnO dopadas con cobalto y cobre al 1% y películas de ZnO dopadas simultanemaente con cobalto y cobre al 1%. El semiconductor en fase solida fue sintetizado utilizando el método sol-gel y para obtener las películas delgadas sobre sustratos de vidrio se utilizó la técnica Doctor Blade. Las películas de ZnO dopadas y sin dopar, fueron caracterizadas a través de medidas de reflectancia difusa, espectroscopia Raman y análisis de difracción de rayos X. Adicionalmente, se verifico el efecto del proceso de dopado sobre las propiedades fotocatalíticas de las películas obtenida, mediante el seguimiento del proceso de fotodegradación de azul de metileno en presencia de luz visible aplicando el modelo de Langmuir-Hinshelwood para obtener los parámetros cinéticos del proceso.[2] Los resultados de espectroscopia Raman y difracción de rayos X permitieron verificar el proceso de dopado del material. Los resultados de reflectancia difusa mostraron que después del proceso de dopado individual y co-dopado se mejoró significativamente la fotorespuesta de las películas de ZnO en el rango visible del espectro electromagnético. Finalmente se verifico que el proceso de dopado y codopado mejoro significativamente la actividad fotocatalítica de las películas de ZnO bajo irradiación visible; logrando un porcentaje de remoción de azul de metileno del 60.2% con las películas de ZnO codopadas con Cu y Co.

Referencias

1. Areeshi M. Y. (2023). A review on biological synthesis of ZnO nanostructures and its application in photocatalysis mediated dye degradation: An overview. *Luminescence : the journal of biological and chemical luminescence*, *38*(7), 1111–1122. https://doi.org/10.1002/bio.4432

2. Khuzwayo, Z., & Chirwa, E. M. N. (2015). Modelling and simulation of photocatalytic oxidation mechanism of chlorohalogenated substituted phenols in batch systems: Langmuir-Hinshelwood approach. *Journal of hazardous materials*, *300*, 459–466. https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2015.07.034

Diagnóstico Molecular De La Enfermedad De Wilson En Cuba

Molecular Diagnosis Of Wilson's Disease In Cuba

Clark, Y. [1], **Ruenes, C.** [2], **Espinosa, G.** [3], **Clark, I.** [4]

[1]Universidad de Guantánamo. Colabora con el Centro Nacional de Genética Médica, Cuba.

[2]Instituto de Gastroenterología, La Habana, Cuba.

[3]Universidad de la Habana, Cuba.

[4]Delegación del CITMA, Cuba.

yclarkf@gmail.com

Área Temática: Bioquímica.

Palabras claves: enfermedad de Wilson, diagnóstico molecular, mutación, polimorfismo, bioinformática.

La enfermedad de Wilson constituye un problema de salud a nivel mundial y el diagnóstico clínico y molecular es complejo. Determinar las mutaciones causantes de la enfermedad de Wilson en Cuba. Visualizar el impacto del uso de las herramientas bioinformáticas en el diagnóstico molecular de la enfermedad de Wilson en Cuba. La extracción de ADN fue por el método de precipitación salina. Se realizó la técnica de PCR, secuenciación, RFLP, SSCP y electroforesis en agarosa para la identificación de las mutaciones y polimorfismos en el gen atp7B. Se utilizaron los siguientes predictores bioinformáticos: SIFT, Mutation Taster y PolyPhen-2. Se identificaron las mutaciones: p.N41S, p.M645R, p.L708P, p.H1069Q y los polimorfismos p.L456V, p.K832R y p.A1140V. Se detectaron portadores, asintomáticos, heterocigóticos compuestos y homocigóticos en las familias analizadas. Con el uso de los predictores bioinformáticos el análisis funcional fue: cuatro Benignas, una con daño posible, dos con daño muy probable con la herramienta Polyphen-2. Tres variantes fueron deletéreas y cuatro no deletéreas con la herramienta SIFT y Mutation Taster. Se realizó el diagnóstico molecular y se visualiza mediante herramientas bioinformáticas el impacto funcional de las mutaciones y los polimorfismos identificados pacientes cubanos con la enfermedad de Wilson, esencial para el entendimiento de la causa molecular y el establecimiento del tratamiento quelante de los pacientes, el pronóstico, la prevención y la realización de una medicina personalizada.

Referencias

Ferenci, P. (2014). Phenotype–genotype correlations in patients with Wilson's disease. Ann. N.Y. Acad. Sci., 1-5.

Ljubić, H., Kalauz, M., Telarović, S., Ferenci, P., Ostojić, R., Noli, M.C. (2016). ATP7B gene mutations in Croatians patients with Wilson Disease. Genetic Testing and Molecular Biomarkers, 20 (3), 112-117.

Diseño De Un Péptido Catiónico Anfipático Que Presenta Actividad Antibacterial Especifica Contra *E. coli O157:H7* y *Klebsiella pneumoniae*

Design Of An Amphipathic Cationic Peptide Exhibiting Specific Antibacterial Activity Against *E. coli O157:H7* and *Klebsiella pneumoniae*

Barbosa, Y. [1,2] **Urquiza, M.** [1,2] **Sinisterra, D.** [1,2] **Guzmán, F.**[3]

[1,2]Grupo de Investigación en Hormonas - Semillero Bioquímica, Biofísica y Biología molecular, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

[3]Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile.

ybarbosan@unal.edu.co

Área Temática: Bioquímica.

Palabras Clave: Resistencia antimicrobiana, péptido antimicrobiano, péptidos helicales, *Escherichia coli* y *Klebsiella pneumoniae*.

La creciente resistencia antimicrobiana, especialmente en bacterias gram negativas catalogadas de prioridad crítica por la OMS, como *Klebsiella pneumoniae* resistente a carbapenémicos y *Escherichia coli* resistente a cefalosporina, representan un riesgo significativo para la salud pública a nivel mundial.

Un péptido anfipático de hélice alfa, diseñado y sintetizado en fase sólida por el Semillero BBBM del Grupo de Investigación de Hormonas en colaboración con la Universidad Católica de Valparaíso, Chile, mostró una actividad antimicrobiana en bacterias gram negativas potencialmente patógenas.

El péptido, caracterizado mediante HPLC, MS y dicroísmo circular, incorpora aminoácidos que no suelen ser frecuentes en hélices alfa, estabilizando la hélice y mejorando su actividad antibacteriana.

Los ensayos antimicrobianos con bacterias gram positivas y gram negativas presentaron una concentración mínima inhibitoria (MIC) menor a 50 µM específicamente en *E. coli* y *K. pneumoniae*.

En cuanto al mecanismo de acción del péptido, basados en los ensayos de coeficiente de partición, el péptido demuestra interacción con la parte hidrofóbica de la membrana, permeabilizándola y retirando contenido celular causando la lisis bacteriana.

Pruebas en eritrocitos humanos y células HEK mostraron una ausencia de hemolisis y citotoxicidad significativa, sugiriendo que el péptido posee un perfil prometedor para futuras aplicaciones terapéuticas.

Referencias

Wong, F., et al. (2024). Discovery of a Structural Class of Antibiotics with Explainable Deep Learning. *Nature*, 626(7997), 177-185. https://doi.org/10.1038/s41586-023-06887-8

Guzmán, F., Gauna, A., Roman, T., Luna. O., Álvarez, C., Pareja-Barrueto, C., Mercado, L., Albericio, F., Cárdenas, C. (2021). Tea Bags for Fmoc Solid-Phase Peptide Synthesis: An Example of Circular Economy. Molecules, 26(16), 5035. doi: 10.3390/molecules26165035.

Desarrollo Analítico Para La Evaluación De La Dinámica De Residuos De Plaguicidas Durante La Cocción De Lentejas y Garbanzos

Analytical Development For The Evaluation Of The Dynamics Of Pesticide Residues During Lentils and Chickpeas Cooking

Cesio María Verónica[1], Bertón Analía[1], Heinzen Horacio [1].

[1]Grupo De Análisis de Compuestos Traza (GACT), Facultad de Química. Universidad de la República, Uruguay.

cs@fq.edu.uy

Área Temática: Química Analítica.

Palabras clave: Residuos, Inocuidad, Procesamiento, plaguicidas, factor de procesamiento.

Día a día la población que no consume alimentos de origen animal crece, y así el consumo de legumbres, fuente de proteínas, carbohidratos, vitaminas y minerales. A estos cultivos se les aplica plaguicidas, por lo que sus residuos deben ser controlados. Es así importante contar con metodologías analíticas para la determinación de los residuos de plaguicidas presentes en legumbres de alto consumo crudas. Debido a que estas leguminosas se consumen cocidas es también importante conocer cómo se comportan estos residuos luego de preparado el alimento para consumo.

El presente trabajo plantea desarrollar un método de preparación de muestra para lentejas y garbanzos crudos, cocidos y sus aguas de cocción. El desarrollo analítico y su validación en las 3 matrices son necesarios para determinar la proporción en la cual los residuos de plaguicidas se distribuyen.

Los analitos del estudio se seleccionaron según las Buenas Prácticas Agrícolas y los tratamientos postcosecha. Se evaluaron metodologías de preparación de muestra para las matrices definidas. Se validó una modificación del método AOAC2007.01 para lentejas y garbanzos. Se extrajeron 5g de legumbre, con ácido acético al 1% en acetonitrilo. Se agregó NaCl, $MgSO_4$ y acetato de sodio. Para el clean-up se agregó Amina Primaria-Secundaria y $MgSO_4$. Se extrajeron 25mL de aguas con ácido acético al 1% en acetonitrilo con 8g de $MgSO_4$. Se agitó y centrifugó y se analizó por cromatografía gaseosa y líquida acoplada a masas en tándem. Para las metodologías seleccionadas se realizó la validación evaluando veracidad a 3 niveles con recuperaciones promedio entre 70-123% y DRS menores al 20%. Se evaluó la linealidad en solvente y matriz entre 10-200 $\mu g\ kg^{-1}$, los límites de cuantificación y el efecto de matriz según documento SANTE.

Con las metodologías validadas fue posible determinar, para los residuos encontrados, el factor de procesamiento y el reparto de ellos desde en el material fresco al cocido y a las aguas de preparación. El 10% de ellos no se detectaron a 20 $\mu g\ kg^{-1}$ luego de cocidos, para los restantes se observó un bajo contenido residual (<30%). Se discutirá la dinámica de distribución, previo remojo de la legumbre y luego de la cocción.

Referencias:

AOAC Official Method 2007.01

Document No SANTE/12682/2019 (European Commission, Directorate General for Health and Food Safety).

Análisis Del Impacto Del Cóctel De Bacteriófagos En El Cultivo De La Microalga *Desmodesmus communis*.

Analysis Of The Impact Of The Bacteriophage Cocktail In The Culture Of *Desmodesmus communis*.

Batista, A.[1,2], Ramírez Sánchez, I.[2], Veyrand Quirós, B.[2], Bauda, K.[2,3], Quiroz Guzmán, E.[2], Arredondo Vega, B.O.[2]

[1]Grupo de Investigación en Biotecnología de Microalgas-CIPNABIOT, Universidad Autónoma de Chiriquí, David, Panamá.
[2]Laboratorio de Biotecnología de Microalgas y Bacteriófagos. Centro de Investigaciones Biológicas del Noroeste (CIBNOR). La Paz, Baja California Sur, México.
[3]Tecnológico Nacional de México, Campo Bahía de Banderas, Nayarit, México.
ariadna.batista@unachi.ac.pa

Área Temática:
Bioquímica

La eficacia y la posible aplicación de la terapia con bacteriófagos como inductores en el mejoramiento de la calidad nutritiva de cultivos microalgales que se utilizan como alimento vivo en instalaciones de acuicultura, aún no ha sido estudiada. El objetivo principal de este estudio fue determinar la efectividad de un cóctel de bacteriófagos en el cultivo de *Desmodesmus communis* y su impacto en la calidad nutritiva de la biomasa microalgal. En el presente estudio se empleó un cóctel de bacteriófagos en el cultivo de la microalga *Demosdesmus communis* (CIB53). Los cultivos control y con el cóctel, se llevaron a cabo en las siguientes condiciones de laboratorio: temperatura 23-25 °C, irradiancia 150 µmol fotón m^{-2} s^{-1}, ciclo de luz: oscuridad 12:12h, pH 7.8, medio f/2. Todos los experimentos se realizaron por cuadruplicado. A los 10 días, la biomasa se cosechó por centrifugación, se lavó con agua destilada estéril, se congeló y liofilizó. Se pesaron 5 mg para cuantificar por métodos espectrofotométricos (Lowry,1951; Ohemeng-Datta, 2018; Bligh y Dyer, 1959), el contenido total de proteínas, carbohidratos y lípidos (porcentaje peso seco). Los ácidos grasos (µg/mg peso seco) y pigmentos (ng/mg peso seco) se cuantificaron por cromatografía GC-FID y HPLC-DAD, respectivamente. Los resultados fueron: proteínas (control l1.9±0.66; coctel 23.9 ±2), carbohidratos (control 23.9±3.14; coctel 14.9±3.3), lípidos (control 20.1 ±2.9; coctel 21.0 ±1.6). Ácidos grasos en control: 18:1ω9 (30.7±1.2) > 18:3ω3 (21.3±1.4)> 16:0 (15.5±1.0)> 18:2ω6 (12.5±0.8); coctel: 18:3ω3 (34.6±5.0)> 18:1ω9 (13.3±0.9)> 16:0 (12.6±1.7)>18:2ω6 (9.6±0.9). Pigmentos en control: clorofila *a* (0.14±0.01), clorofila *b* (0.007±0.005), luteína (0.038±0.03), β-caroteno (0.011±0.005), violaxantina (0.004±0.003); coctel: clorofila a (2.67±0.49), clorofila *b* (0.157±0.03), luteína (0.39±0.07), β-caroteno (0.142±0.038), violaxantina (0.043±0.007). Se propone el uso de bacteriófagos como una herramienta potencial para mejorar la calidad nutritiva de la biomasa de la microalga *Desmodesmus communis*.

Palabras clave: mejoramiento del cultivo de *Desmodesmus*, acuicultura, fagoterapia, calidad nutritiva.

- Referencias: Lowry, O., Rosebrough, N., Farr, A. L., & Randall, R. (1951). Protein measurement with the Folin phenol reagent. *Journal of biological chemistry*, *193*(1), 265-275.

Bligh, E. G., & Dyer, W. J. (1959). A rapid method of total lipid extraction and purification. *Canadian journal of biochemistry and physiology*, *37*(8), 911-91

36° CLAQ 2024
PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

36° CLAQ 2024
PANAMÁ

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

¡El CENAMEP AIP da inicio al desarrollo de la Metrología Química en Panamá!

Panamá avanza en el desarrollo de la metrología química con el proyecto en curso en el CENAMEP AIP, que se centra en la creación de un laboratorio de referencia especializado en esta área.

El CENAMEP apoyará a los laboratorios de ensayos mediante la producción de Materiales de Referencia (MR) y Materiales de Referencia Certificados (MRC), así como la organización de Ensayos de Aptitud.

¡Estamos emocionados por este nuevo desarrollo y listos para apoyar a la comunidad científica y a la industria con servicios de vanguardia en metrología química!

CENAMEP AIP

Ciudad del Saber, Calle Luis Bonilla,
Edificio 206 Panamá
Teléfono: (+507) 517-3100 E-mail:
servicios@cenamep.org.pa

Exposiciones Póster

36º CLAQ 2024
PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Tabla De Posters

Actividad Antihipertensiva In Vitro y Antioxidante Del Lulo Amazónico Cocona (Solanum sessiliflorum D.) *1*

In vitro Antihypertensive and Antioxidant Activities Of The Amazonian lulo Cocona (Solanum sessiliflorum D.) 1

Valorizacion De Residuos De Espino Maulino (Acacia Caven) Y Avellana Chilena (Gevuina Avellana) Mediante La Obtención De Compuestos Fenólicos Con Poder Antioxidante Y Antimicrobiano Mediante Sistema De Ultrasonido . *2*

Valorization Of Waste Of Hawthwood (Acacia Caven) And Chilean Hazelnut (Gevuina Avellana) By Obtaining Phenolic Compounds With Antioxidant And Antimicrobial Power Using An Ultrasound System 2

Determinación De Acrilamida En Bebidas De Café Arábigo (C. arábica), Variedad Catuaí Tostado Artesanalmente *3*

Determination Of Acrylamide In Hand-Roasted Arabica Coffee (*C.arabica),* Catuaí variety 3

Mejora Del Comportamiento Termico De Aceite De Pepa De Zapallo No Refinado Adicionado De Ingredientes Culinarios *4*

Improvement Of The Thermal Behavior Of Unrefined Pumpkin Seed Oil With Addition Of Culinary Ingredients 4

Bio-Refinación De Compuestos Bioactivos De Alto Valor Funcional A Partir De Avellana Chilena (Gevuina avellana) Utilizando CO_2 Supercrítico Y Extracción Acelerada Con Solventes *5*

Bio-Refining Of Bioactive Compounds Of High Funtional Value From Chilean Hazelnut (*Gevuina avellana*) Using Supercritical CO_2 And Accelerated Extraction With Solvents 5

Aplicación De La Espectroscopia Infrarroja En La Adulteración De Cúrcuma Longa *6*

Application Of Infrared Spectroscopy In The Adulteration Of Curcuma Longa 6

Estudio De Los Compuestos Activos En El Aroma De La Pitanga (Eugenia uniflora L.) *7*

Odor Active Compounds Studies On The *(Eugenia uniflora L)* Pitanga Fruit Aroma .. 7

Uso De NaDES Para La Extracción De Betalaínas En Semillas De Espinaca Como Solventes Listos Para Usar En La Formulación De Caramelos Duros *8*

Use Of NaDES For The Extraction Of Betalains In Spinach Seeds as Ready-To-Use Solvents In The Formulation Of Hard Candies 8

Estudio De La Cinética De Liberación De Capsaicina A Partir De Una Emulsión O/W Encapsulada En Perlas De Pectina *9*

Study Of The Kinetics Of Capsaicin Release From An O/W Emulsion Encapsulated In Pectin Beads 9

Efecto De La Adición De Extractos Carotenoides Obtenidos De Las Cáscaras De Cocona (Solanum sessiliflorum) Y Tumbo Serrano (Passiflora tripartita var. mollisima) Sobre Las Propiedades Y La Estabilidad De Color En Helados De Crema *10*

Effect Of The Addition Of Carotenoid Extracts Obtained From The Shells Of Cocona (*Solanum sessiliflorum*) And Tumbo Serrano (*Passiflora tripartita* var. mollisima) On The Properties And Color Stability In Cream Ice **10**

Obtención De Antioxidantes Naturales De Extractos De La Vaina Y Semilla Del Espino Maulino (acaia caven) Mediante SC-CO_2 y ASE Capaces De Inhibir La Oxidación De Diferentes Matrices Lipidicas Y Su Comparacion Con Metodos Tradicionales *11*

Obtaining Natural Antioxidants From Extracts Of The Pod And Seed Of The Hawthhow (*acacia caven*) Using SC-CO_2 And ASE Capable Of Inhibiting The Oxidation Of Different Lipid Matrices And Their Comparison With Traditional Methods **11**

Adaptación Del Método De Análisis De Carotenoides En Queso Americano Utilizando Extracción En Medio Neutro Y UHPLC-DAD *13*

Extracción De Pectina A Partir De La Cáscara De Cacao (Theobroma cacao L.) Para Su Aplicación En La Remoción De Cr (VI) En Medio Acuoso *14*

Extraction Of Pectin From Cocoa Pod Husk (*Theobroma cacao L.*) For Application In The Removal Of Cr (VI) In Aqueous Medium **14**

Cómo Ha Surgido El Estudio De Las Emulsiones, Y Su Paso A Las Pickering De Nanocelulosa: Un Análisis Bibliométrico *15*

How Emulsion Studying Appearing And Its Change To Pickering Nanocellulose Emulsion: A Bibliometric Analysis. **15**

Método Multi-Residuo Para La Identificación Y Cuantificación De Pesticidas En Agua Superficial Por UHPLC/ESI-Q-Orbitrap-MS *16*

Multi-Residue Method To Screening And Quantification Of Pesticides In Surface Waters By UHPLC/ESI-Q-Orbitrap-MS **16**

Carbonizados Derivados Del Bagazo De Fique Para La Remoción De Metilparabeno *17*

Methylparaben Adsorption Onto Carbonaceous Materials Derived From Fique Bagasse **17**

Evaluación De Contaminantes De Preocupación Emergente Y Genes De Resistencia A Antibióticos En El Río Mapocho (Chile): Un Estudio Exhaustivo Sobre La Calidad Del Agua Y El Impacto De Las Aguas Residuales Municipales *18*

Assessment Of Contaminants Of Emerging Concern And Antibiotic Resistance Genes In The Mapocho River (Chile): A Comprehensive Study On Water Quality And Municipal Wastewater Impact **18**

Transformación Catalítica De Alcohol Fusel Utilizando Òxidos Metálicos Mixtos *19*

Catalytic Transformation Of Fusel Oil Employing Mixed Metal Oxides 19

Transformación Catalítica De Alcohol Isoamílico Y Etanol Utilizando Òxidos Metálicos Mixtos Sustituidos Con Zn-Cu y Zn-Ni 20

Catalytic Transformation Of Isoamyl Alcohol And Ethanol Employing Mixed Metal Oxides Substitute With Zn-Cu and Zn-Ni..... 20

Degradación Fotocatalítica De Acetamiprid Por Òxidos Mixtos De Titania-Sílice 21

Photocatalytic Degradation Of Acetamiprid By Titania-Silica Mixed Oxides 21

Catálisis Heterogénea Para La Valorización De Residuos De Café: Producción De Furfural, 5- Hidroximetilfurfural Y Ácido Levulínico..... 22

Heterogeneous Catalysis For The Valorization Of Coffee Waste: Furfural, 5-Hydroxymethylfurfural And Levulinic Acid Production..... 22

Obtención De Un Material Adsorbente A Partir De Biomasa Forestal Y Su Empleo En La Remoción De Plaguicidas 23

Obtaining An Adsorbent Material From Forest Biomass And Use For Pesticides Removal 23

Optimización De La Degradación Del Colorante Negro Àcido 194 Mediante El Sistema Peroximonosulfato Activado Con Especies De Cobalto 24

Optimisation Of The Degradation Of The Dye Acid Black 194 Using The Peroxymonosulphate System Activated With Cobalt Species 24

Efecto De Aluminio En Daño Oxidativo Y Sistema Antioxidante En Caña (Saccharum officinarum) Bajo Condiciones De La Amazonia Colombiana.... 25

Effect Of aluminum On Oxidative Damage And Antioxidant System In Sugarcane (*Saccharum officinarum*) Under Conditions Of The Colombian Amazon 25

Reducción Electroquímica Del Dióxido De Carbono Sobre Electrodos De Cobre Modificados Con Co/Cu Para La Obtención Selectiva De Metanol..... 26

Electrochemical Reduction Of Carbon Dioxide On Copper Electrodes Modified With Co/Cu For Selective Methanol Production. 26

Distribución De Microplásticos En Litorales De Las Playas Del Caribe Colombiano 27

Distribution Of Microplastics On The Shores Of Colombian Caribbean Beaches... 27

Montaje Y Operación De Composteras Autónomas Para El Aprovechamiento De Residuos 28

Mount And Operation Of Autonomous Composters For The Use Of Waste 28

Isotermas Y Cinética De Adsorción De Cr^{3+}, Cr^{6+}, Hg^{2+}y Pb^{2+} En Fibra Natural Biosorbente 29

Isotherms And Adsorption Kinetics Of Cr^{3+}, Cr^{6+}, Hg^{2+} and Pb^{2+} In Natural Biosorbent Fiber 29

Procesos De Adsorción De Fósforo Y Magnesio En Residuo Del Procesamiento De Fique Como Un Posible Uso De Biofertilizante..... 30

Phosphorus And Magnesium Adsorption Processes In Fique Processing Waste As A Possible Use Of Biofertilizer **30**

Percepción de los estudiantes universitarios de los efectos del cambio climático en la seguridad alimentaria 2023 ..... ***30***

Perception of university students of the effects of climate change on food security 2023 ..... **30**

Estudio De La Cinética De Liberación De Fertilizantes A Partir De Micropartículas De Biocarbón Impregnadas Con Fertilizantes Y Encapsuladas En Perlas De Alginato De Calcio ***32***

Study Of The Release Kinetics Of Fertilizers From Biochar Micro Particles Impregnated With Fertilizers And Encapsulated In Calcium Alginate Beads **32**

Revisión De La Titulación De Boehm En La Determinación De Grupos Funcionales Oxigenados En Biocarbones ***33***

Boehm Revisited Titulation Of Oxigenated Funcional Groups Determination In Biochar **33**

Evaluación De La Capacidad Bioestimulante De Microalgas Nativas De Las Regiones De Barú Y Alanje, Provincia De Chiriquí ***34***

Evaluation Of Biostimulant Capacity From Native Microalgae Of The Barú And Alanje Regions, Chiriquí Province **34**

Actividad Antioxidante Y Contenido De Compuestos Polifenólicos En Diferentes Variedades De Caña (Saccharum officinarum L.), Cultivadas En La Amazonia Colombiana ***35***

Antioxidant Activity And Polyphenolic Compound Content In Different Varieties Of Sugarcane (*Saccharum officinarum* L.) Cultivated In The Colombian Amazon **35**

Formas De Eliminación De Medicamentos No Consumidos Y/O Vencidos En Hogares Del Distrito De Chorrillos, Lima-Perú ***36***

Ways To Dispose Of Unconsumed And/Or Expired Medications In Homes In The District Of Chorrillos, Lima-Perú **36**

Síntesis De Biocatalizadores Heterogéneos De Peroxidasa De Panicum Maximum Inmovilizada En Carbón Activado Para La Degradación De Ìndigo Carmín ***37***

Synthesis Of Heterogeneous Biocatalysts Of *Panicum Maximum* Peroxidase Immobilized On Activated Carbon For Indigo Carmine Degradation **37**

Evaluación De Los Niveles De NO_2 y SO_2 En Diversas Zonas Con Alto Tráfico En Panamá ***38***

Evaluation Of NO_2 And SO_2 Levels In Various High-Traffic Areas In Panama **38**

Evaluación De Los Niveles De Ozono Y CO_2 En Diversas Zonas Con Alto Tráfico En Panamá ***39***

Evaluation Of Ozone And CO_2 Levels In Various High-Traffic Areas In Panama **39**

Evaluación De Los Niveles De PM_{10} y $PM_{2.5}$ En Diversas Zonas Con Alto Tráfico En Panamá ***40***

Evaluation Of PM_{10} And $PM_{2.5}$ Levels In Various High-Traffic Areas In Panama 40

Estudio De La Interacción De Fengicinas Producidas Por Bacillus velezensis $MEP_2$18 Con Modelos De Membrana Representativos De Pseudomonas Aeruginosa *41*

Study Of The Interaction Of Fengycins From *Bacillus velezensis* $MEP_2$18 With Model Representative Membranes Of *Pseudomonas Aeruginosa* 41

Evaluación Del Efecto De Los Péptidos Crotalicidina YNA-CATH-ATRA1-ATRA1 En Modelos De Células De Cáncer Mediante Espectroscopia Infrarroja *42*

Evaluation Of the effect Of Crotalicidin And NA-CATH-ATRA1-ATRA1 In Models Of Cancer Cells By Infrared Spectroscopy 42

La Fracción Enriquecida ZC1 De Un Extracto De Zanthoxylum sp Produce Cambios Cognitivos Y Moleculares En Animales 3xTg-AD *43*

The ZC1-Enriched Fraction Of A Zanthoxylum sp Extract Produces Cognitive And Molecular Changes In 3xTg-AD Animals 43

Extractos De Plantas Con Potencial aActividad Agonista LXR Como Una Estrategia Terapéutica Contra La Enfermedad De Alzheimer *44*

Plant Extracts With Potential LXR Agonist Activity As A Therapeutic Strategy Against Alzheimer's Disease (AD) 44

Búsqueda De Agonistas Del Receptor X Hepático En Un Extracto Del Género Zanthoxylum *45*

Search For Liver X Receptor Agonists In An Extract From The Genus *Zanthoxylum* 45

El Azul De Toluidina Y Sus Derivados En Asociación Con La Albúmina De Suero Humano Hacia Aplicaciones Fotoquímicas *46*

Toluidine Blue And Derivatives In Association With Human Serum Albumin Towards Photochemical Applications 46

Análisis Metabolómico Basado En Espectrometría De Masas De Alta Resolución Revela Diferencias Metabólicas Entre Células Planctónicas Y Sésiles De Salmonella Enteritidis ATCC 13076 ..... *47*

Metabolomic Analysis Based On High-Resolution Mass Spectrometry Reveals Metabolic Differences Between Planctonik And Sessile Cells Of *Salmonella* Enteritidis ATCC 13076 47

Identificación, Aislamiento Y Caracterización De Toxinas Que Afectan El Canal De Potasio (KTx) Del Escorpión Centruroides bicolor *48*

Uso De Un Péptido De Unión A La Integrina αvβ6 Para La Detección De Células Cancerosas Que La Expresan *49*

An αvβ6 Integrin-Binding Peptide Used For Detecting Cancer Cells That Express It 49

Péptidos Quiméricos Anti-αvβ6 y NF-κB Inducen Muerte Celular Regulada En Líneas Celulares Tumorales De Manera Selectiva Según El Nivel De Expresión De La Integrina αvβ6 ..... *50*

Chimeric Anti-αvβ6 And NF-κB Peptides Induces Regulated Cell Death In Tumor Cell Lines Selectively Based On αvβ6 Integrin Expression Levels 50

Evaluacion Del Comportamiento De Gymnodinium catenatum y Alexandrium sp. En Los Medios De Cultivo GSe y f/2 Y Su Perfil Lipídico 51

Evaluation Of The Behavior Of Gymnodinium catenatum and Alexandrium sp. IN GSe and f/2 Culture Media And Its Lipid Profile 51

Extracción Y Análisis De Pigmentos De Hongos Filamentosos Deteriorantes De Las Encuadernaciones En Pergamino De Unidades Bibliográficas Del Fondo Antiguo De La Biblioteca Nacional De Colombia (BNC)..... 52

Extraction And Analysis Of Filamentous Fungal Pigments From The Parchment Bindings Of Bibliographic Units Of The Ancient Collection Of The National Library Of Colombia (NLC) 52

Diseño de Primers Para Genes Relacionados Con La Síntesis De Compuestos De Interés En Cannabis Sativa Var. Mango Biche 53

Primer Design For Genes Related To The Synthesis Of Compounds Of Interest In *Cannabis sativa* Var. Mango Biche 53

Hepcidina Como Marcador Inflamatorio, Y Su Relación Con El Fierro, Transferrina Y Ferritina En Pacientes Post COVID-19 De Villa El Salvador, Lima-Perú 54

Hepcidin As An Inflammatory Marker, And Its Relationship With Iron, Transferrin And Ferritin In Post-COVID-19 Patients From Villa El Salvador, Lima, Peru 54

Estudio De Los Procesos Fotosensibilizados De Un Derivado De Azul De Toluidina Sobre Macromoléculas De Importancia En La Terapia Fotodinámica 55

Study Of Photosensitizing Processes Of A Toluidine Blue Derivative On Macromolecules Of Importance In Photodynamic Therapy..... 55

Química Plegada: Una Nueva Configuración Para Aprender Química Folded 57

Chemistry: New Setup For Learning Chemistry 57

Proposición De La Disciplina De Química Con Relación Al Plan De Estudios De La Educación Básica En Países Sudamericanos Vinculados A La UNESCO ... 58

Proposition Of The Chemistry Subject Regard To Basic Education Curriculum In South American Countries Associated To UNESCO 58

Evaluación Del Poder Antioxidante De Extractos Bioactivos Obtenidos De La Hoja De Coffea arabica L. Desafío Para El Desarrollo De Habilidades Investigativas. 59

Evaluation O The Antioxidant Power Of Bioactive Extracts Obtained From The Leaf Of *Coffea arabica* L. Challenge For The Development Of Research Skills..... 59

Influencia de la metodología ABP sobre la argumentación de los juicios metacognitivos en ciencias de docentes en formación del programa de Licenciatura en Ciencias Naturales de la Universidad de Caldas 60

Influence of the ABP methodology on the argumentation of metacognitive judgments in science for teachers in training in the Bachelor of Natural Sciences program at the University of Caldas..... 60

Caracterización de psilocibina por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas *61*

Use of gas chromatography coupled to mass spectrometry for characterization of psilocybin 61

Estudio Preliminar de Bisfenol A en botellas plásticas reutilizables en Panamá mediante LC-MS/MS no dirigido *62*

Preliminary Study of Bisphenol A in Reusable Plastic Bottles in Panama using Non-targeted LC-MS/MS 62

Perfil Químico de Metales Pesados en Alimentos de Consumo Frecuente en la ciudad de Panamá: un Estudio Piloto *64*

Chemical Profile of Heavy Metals in Frequently Consumed Foods in Panama City: a pilot study 64

Estudio Piloto de la Exposición perinatal al DDE a través de leche materna en la cohorte materno-infantil: PA-MAMI *65*

Pilot Study of Perinatal Exposure to DDE through breast milk in the maternal-infant cohort: PA-MAMI 65

Estudio de las propiedades catalíticas de nanopartículas de óxido de cerio dopado con gadolinio en la reacción de transesterificación del aceite de girasol para la obtención de biodiésel *67*

Study of the catalytic properties of gadolinium-doped cerium oxide nanoparticles in the transesterification reaction of sunflower oil to obtain biodiesel 67

Interacciones iónicas en gelificante de bajo peso molecular basado en L-Valina y ácido succínico *68*

Ionic interactions in a low molecular weight gelator based on L-Valine and succinic acid 68

Evaluación comparativa de la remoción de fosfatos en matrices simuladas y reales con cascarilla de arroz transformada química y térmicamente *69*

Comparative evaluation of the removal of phosphates in simulated and real matrices with chemically and thermally transformed rice husk 69

Formación de enlaces covalentes dinámicos de ácidos borónicos en la interfaz polímero-nanopartículas para la obtención de hidrogeles nanocompuestos inyectables *70*

Dynamic covalent bond formation of boronic acids at the polymer-nanoparticle interface for the creation of injectable nanocomposite hydrogels 70

Turning waste into resources. Efficient synthesis of biopolyurethanes from used cooking oils and CO_2 71

Nanopartículas de magnetita modificadas con un gelificante de bajo peso molecular basado en L-Valina y ácido succínico para su uso en hipertermia *72*

Nanopartículas de Oro Funcionalizadas con Gelificante Basado en L-Valina y Ácido Succínico: Aplicaciones Potenciales en Hipertermia *73*

Síntesis de nanohíbridos basados en nanosílice y celulosa obtenida a partir de linteres de algodón: Estabilidad termo-reológica y cinética de gelificación para tratamientos de conformance químico *74*

Synthesis of nanohybrids based on nanosilica and cellulose obtained from cotton linters: Thermo-rheological stability and gelation kinetics for chemical conformance treatments **74**

Caracterización de envases poliméricos Mediante Espectroscopía RAMAN y FTIR..... *75*

Characterization of polymeric containers Using RAMAN and FTIR Spectroscopy .. **75**

Síntesis de materiales compuestos con potencial aplicación como fotocatalizadores para la producción de hidrogeno en una celda fotoelectroquímica *76*

Synthesis of composite materials with potential application as photocatalysts for hydrogen production in a photoelectrochemical cell **76**

Utilización de electrodo de carbón vítreo dopado con poli anilina en la determinación de urea en soluciones acuosas por técnicas electroquímicas *77*

Use of glassy carbon electrode doped with polyaniline for the determination of urea in aqueous solutions by electrochemical technics..... **77**

Diseño de Nanocápsulas Poliméricas Como Vehículos Para La Liberación Controlada de Hierro *78*

Design of Polymeric Nanocapsules as Carriers for Controlled Release of Iron..... **78**

Desarrollo de un bioinsecticida a partir de aceites esenciales encapsulados en nanopartículas poliméricas con estructura "core-shell"..... *79*

Development of a bioinsecticide from essential oils encapsulated in polymeric nanoparticles with a "core-shell" structure **79**

Desempeño de la ZIF-71(ClBr) en la separación de una mezcla ABE *80*

Performance of ZIF-71(ClBr) in the separation of an ABE mixture..... **80**

Caracterización de micelas poliméricas derivadas del autoensamble de copolímeros de monometoxi-poli(etilenglicol)-poli(ε-caprolactona)..... *81*

Characterization of polymeric micelles derived from the self-assembly of monomethoxy-poly(ethylene glycol)-poly(ε-caprolactone) copolymers **81**

Implementación de polimerizaciones controladas para la fabricación de estándares de peso molecular basados en polimetilmetacrilato, poliestireno y policaprolactona *82*

Implementation of controlled polymerizations for the manufacture of molecular weight standards based on polymethylmethacrylate, polystyrene and polycaprolactone **82**

Caracterización química de pasivos mineros en Tilarán, Guanacaste, Costa Rica, a través de las técnicas de espectrofotometría de absorción atómica y fluorescencia de Rayos X de tipo energía dispersiva..... *83*

Chemical characterization of mining liabilities in Tilarán, Guanacaste, Costa Rica, through atomic absorption spectrophotometry and energy-dispersive X-ray fluorescence techniques 83

Desempeño de superficies a base de polímeros y de solventes polares con soluciones de petróleo/hexano 84

Performance of polymeric surfaces and polar solvent with petroleum/hexane solutions 84

Estudio morfológico de nano-apatitas depositadas sobre andamios de Ácido Poliláctico impresos por FDM 85

Morphologial study of nanoapatite coatings on Polilactic Acid scaffoldings printed by FDM 85

Síntesis no convencional de óxido de zinc a escala nanométrica empleando extracto etanolico de hojas de Calea sessiliflora Less 86

Non-conventional synthesis of zinc oxide on a nanometric scale using ethanol extract of Calea sessiliflora Less leaves 86

Degradación fotocatalítica en fase sólida de residuos de poliestireno expandido (EPS) bajo radiación UV 87

Solid-phase photocatalytic degradation of expanded polystyrene (EPS) waste under UV radiation 87

Estudio cinético de la condensación de Knoevenagel entre la 5-metoxi-1-tetralona y el ácido glioxílico catalizada en medio ácido 88

Kinetic study of the Knoevenagel condensation between 5-methoxy-1-tetralone and glyoxylic acid catalyzed in acidic medium 88

Síntesis de Agentes Quelantes Derivados de Quinolilpirazolona 88

Synthesis of Chelating Molecules from Quinolylpyrazolone 88

Síntesis de Algunas Bisamidas Derivadas de Pirazolona 90

Synthesis of Some Pyrazolone-derived Bisamides 90

Optimización de la Actividad Biológica de Péptidos Derivados de la Lactoferrina Bovina: Conjugación con Motivos no Proteicos como Estrategia 91

Optimizing Biological Activity of Lactoferricin-Derived Peptides: Conjugation with Non-Peptidic Motifs as a Strategy 91

Auxiliares de Molienda Quirales en la Desimetrización de Oximas Cíclicas Via Reordenamiento de Beckmann 92

Chiral Grinding Auxiliaries in the Desymmetrization of Cyclic Oximes via Beckmann Rearrangement 92

Síntesis de nuevos híbridos quinolina-chalcona como posibles agentes antioxidantes e inhibidores de oxígeno singlete 93

Synthesis of new quinoline-chalcone hybrids as possible antioxidant agents and oxygen singlet inhibitors 93

Síntesis y caracterización de 3-[(5-amino-1,3-dimetil-1H-pirazol-4-il)(4-metoxifenil)metil]-4-hidroxicumarina *94*

Synthesis and characterization of 3-[(5-amino-1,3-dimethyl-1*H*-pyrazol-4-yl)(4-methoxyphenyl)methy]-4-hydroxycoumarin 94

Síntesis de derivados de curcumina con potencial neuroprotector *95*

Estudios De La Relación Cuantitativa Actividad-Estructura (Qsar) De Análogos De Flavonoides Con Potencial Actividad Biológica Contra La Línea Celular Mcf-7..... *96*

Studies Of The Quantitative Activity-Structure Relationship (Qsar) Of Flavonoid Analogs With Potential Biological Activity Against The Mcf-7 Cell Line 96

Síntesis de derivados de benzotriazol, evaluación de sus propiedades fotofísicas y potencial aplicación en la generación de bioimágenes y OLED . 97

Synthesis and evaluation of photophysical properties of benzotriazole derivatives and their potential application in cell imaging and OLEDs 97

Diseño y síntesis de un nuevo híbrido imidazol-3,4-dihidropirimidin-2(1H)-tiona *98*

Design and synthesis of new imidazole-3,4-dihydropyrimidin-2(1*H*)-thione hybrid 98

Preparación de 2,3-diaril-2,3-dihidroquinazolin-4(1H)-onas, quinazolin-4(3H)-onas y su conversión a quino[2,1-b]quinazolin-12-onas. ¿Cuáles derivados se deberían preparar? Caso de estudio empleando un mapa auto-organizados de Kohonen basado en parámetros de Lipinski *99*

Preparation of 2,3-diaryl-2,3-dihydroquinazolin-4(1*H*)-ones, quinazolin-4(3*H*)-ones and their conversion to quino[2,1-*b*]quinazolin-12-ones. Which derivatives should be prepared? Case study using a self-organized Kohonen map based on Lipinski parameters 99

Aislamiento y caracterización de metabolitos secundarios del hongo endófito Lasiodiplodia iranensis F0619 ..... *100*

Isolation and characterization of secondary metabolites from the endophytic fungus *Lasiodiplodia iranensis* F0619 100

Perfil químico de muestras de café de la variedad geisha determinados mediante UPLC-MS/MS..... *101*

Chemical Profile of Geisha variety coffee samples by UPLC-MS/MS 101

Híbridos de quinolina-benzotiazol como nuevos luminógenos AIE y quimiosensores fluorescentes eficientes para iones de cianuro *102*

Quinoline-benzothiazole hybrids as new AIE luminogens and efficient fluorescent chemosensors for cyanide ions..... 102

Frutales silvestres infrautilizados de la Región Pacífica colombiana: estudio del contenido de fenoles y la capacidad antioxidante..... *103*

Low used wild fruits from the colombian Pacific Region: study of phenolic contents and antioxidant capacity 103

Análisis De Los Compuestos Volátiles Y De La Actividad Antioxidante Del Aceite Esencial De Orégano (Origanum Vulgare L.) *104*

Analysis Of Volatile Compounds And Antioxidant Activity Of The Essential Oil Of Oregano (Lamiaceae: *Origanum Vulgare* L.) 104

Efecto del solvente y el tiempo en la extracción de compuestos fenólicos y actividad antioxidante del fruto amazónico Pouroma cecropiifolia *105*

Effect of solvent and time on the extraction of phenolic compounds and antioxidant activity from the amazonian fruit *Pouroma cecropiifolia* 105

Exploración de Propiedades Antifúngicas en Aceites Esenciales de Piper spp. frente a Moniliophthora roreri, patógeno del cacao (Theobroma cacao L.) ... *106*

Exploration of Antifungal Properties of Essential Oils of *Piper* spp. against *Moniliophthora roreri,* pathogen of cocoa *(Theobroma cacao* L.) 106

Simulación de las propiedades farmacocinéticas de cetocarotenoides provenientes de mamey (Pouteria sapota) *107*

Caracterización metabolómica y evaluación de la actividad biológica de Urceolina caucana: un enfoque hacia la identificación de nuevas fuentes de compuestos bioactivos con aplicación en el tratamiento del Alzheimer *108*

Metabolomic characterization and evaluation of the biological activity of *Urceolina caucana:* an approach towards the identification of new sources of bioactive compounds with application in the treatment of Alzheimer's disease 108

Caracterización Química y actividad antioxidante de 2 aceites esenciales de Especies Aromáticas de Panamá *109*

Chemical Characterization and antioxidant activity of 2 essential oils of Aromatic Species from Panama 109

Análisis de la actividad biocida de las hojas del Schinus molle contra el Adioristus spp de la Quinua y perfil metabolómico por HPLC-MS *110*

Analysis of the biocidal activity of Schinus molle leaves against Adioristus spp of Quinoa and metabolomic profile by HPLC-MS 110

Desarrollo de una formulación insecticida a partir de desechos agroindustriales basada en la aplicación de los diseños estadísticos de experimentos para el control de T.castaneum y S.zeamais *111*

Development of an insecticidal formulation from agro-industrial waste based on the application of statistical experimental designs for the control of T. castaneum and S. zeamais 111

Diseño in silico y síntesis de inhibidores de la enzima LSD1 con potencial terapéutico contra cáncer de mama *112*

In silico design and synthesis of LSD1 enzyme inhibitors with therapeutic potential against breast cancer 112

Estudio del potencial bioactivo de la mashua (Tropaeolum Tuberosum) enfocado en su actividad antioxidante y propiedades terapéuticas: una revisión bibliográfica *113*

Study of the bioactive potential of mashua (Tropaeolum Tuberosum) focused on its antioxidant activity and therapeutic Properties: a bibliographic review 113

Estudio térmico de la copigmentación de antocianinas y su efecto en la inhibición de estrés oxidativo 114

Thermal study of anthocyanin copigmentation and its effect on oxidative stress inhibition 114

Caracterización química preliminar de extractos de algas del Caribe Colombiano con potencial actividad antimicrobiana frente a cepas de Staphylococcus epidermidis y Cutibacterium acnes. 115

Preliminary chemical characterization of algae extracts from Colombia Caribbean with outstanding antimicrobial activity against S. epidermidis y C. acnes. 115

Estudio del potencial inhibitorio de algunas especies del género Piper frente a lipasa pancreática 116

Actividad antioxidante y microbiana de esteroles de tres fuentes de productos naturales 117

Antioxidant and microbial activity of sterols from three natural product sources. 117

Extracción, análisis por UPLC-MS y evaluación de la actividad biológica de carotenoides en huevos, algas y arándanos 118

Extraction, analysis by UPLC-MS and evaluation of the biological activity of carotenoids in eggs, algae and blueberries. 118

Comparación de la Diversidad Metabólica de las Hojas de Dos Variedades de Coffea arabica cultivadas en Panamá 119

Comparison of the Metabolic Diversity of the Leaves of Two Varieties of Coffea arabica Cultivated in Panama 119

Computer-Aided Selection of Antibacterial Phenolic Compounds Targeting Pyruvate Kinase in Methicillin-Resistant *Staphylococcus aureus* (MRSA) 120

Selección Asistida Computacionalmente de Compuestos Fenólicos Antibacteriales Dirigidos a Piruvato Quinasa en Staphylococcus aureus resistente a la meticilina (MRSA) 120

Bioprospección de hongos endófitos del café panameño: Potencial Bioactivo y Aplicaciones en Salud Humana de las cepas GEF-7-34.1 y GEF7-28.14..... 121

Bioprospecting of Endophytic Fungi from Panamanian Coffee: Bioactive Potential and Human Health Applications of Strains GEF-7-34.1 and GEF7-28.14 121

Epoxidación de ciclohexeno mediante el uso de Machine Learning 122

Cyclohexene Epoxidation Using Machine Learning 122

Síntesis enzimática de biodiesel a través de nuevos biocatalizadores de lipasas inmovilizadas en carbón activado obtenido de cáscaras de plátano 123

Enzymatic synthesis of biodiesel by new lipase biocatalysts immobilized on activated carbon obtained from banana peel 123

Valorización de subproductos de mandarina (Citrus reticulata): composición proximal, identificación de compuestos volátiles y caracterización estructural de polisacáridos en hoja y epicarpio *124*

Valorization of tangerine (*Citrus reticulata*) byproducts: proximal composition, identification of volatile compounds and structural characterization of polysaccharides in leaf and epicarp 124

Aceite de Aguacate (Persea americana Mill.) var. Lorena y Monoglicéridos: Una Sinergia para la Producción de Oleogeles *126*

Avocado Oil (*Persea americana Mill.*) var. Lorena and Monoglycerides: A Synergy for Oleogel Production 126

Exploración de alternativas menos tóxicas para la formulación de pinturas: Una revisión sistemática para reducir la contaminación e intoxicación por plomo. *128*

Exploration of less toxic alternatives for paint formulation: A systematic review to reduce lead contamination and poisoning. 128

Abordando la crisis energética: una revisión sistemática sobre biocombustibles líquidos como estrategia rentable para la diversificación energética *129*

Addressing the energy crisis: A systematic review of liquid biofuels as a cost-effective strategy for energy diversification 129

Síntesis y Caracterización de composites de óxido de grafito-CuO. Electrocatálisis de 2.4 dinitrofenol. *130*

Synthesis and characterization of graphite-CuO oxide composites. Electrocatalysis of 2.4 dinitrophenol. 130

Evaluación de métodos alternativos para la cuantificación de nitratos en aguas de consumo humano *131*

Evaluation of alternative methods for quantifying nitrates in water for human consumption 131

Determinación de Carbohidratos No Estructurales Totales en Híbridos Mejorados de Urochola humidicola mediante espectroscopia Uv-Vis *132*

Determination of Total Non-Structural Carbohydrates in Improved Hybrids of *Urochola humidicola* by Uv-Vis Spectroscopy. 132

Estudio del Comportamiento Electroquímico de un Ligando Derivado de Terpiridina al Interaccionar con Iones Cobre, Zinc y Mercurio en Medio Acuoso *133*

Study of the Electrochemical Properties of terpyridine-derived ligand when Interacting with Copper, Zinc, and Mercury Ions in Aqueous Media 133

Efecto del tratamiento térmico sobre la microestructura y cristalinidad de hidroxiapatita obtenida de hueso cortical bovino. *134*

Effect of heat treatment on the microstructure and crystallinity of hydroxyapatite obtained from bovine cortical bone. 134

Análisis cualitativo de sustancias volátiles procedentes de envases plásticos destinados al contacto con alimentos en Panamá mediante Cromatografía de Gases acoplado a Espectrometría de Masas (GC-MS) *135*

Qualitative analysis of volatile substances from plastic containers intended for contact with food in Panama using Gas Chromatography coupled to Mass Spectrometry (GC-MS) **135**

Fabricación y modificación de electrodos serigrafiados con PEDOT-Cu sintetizado químicamente para la detección de glifosato *136*

Manufacture and modification of silkscreened electrodes with chemically synthesized PEDOT-Cu for glyphosate detection **136**

Validación del método de análisis de metales en granos por espectrometría de emisión atómica con plasma acoplado inductivamente (ICP-OES), Provincia de Panamá, República de Panamá. *137*

Validation of an analytical method for the analysis of metals in grains by inductively coupled plasma atomic emission spectrometry (ICP-OES), Province of Panama, Republic of Panama. **137**

Gonzales, L. (17 de julio de 2019). Qse Academy. Obtenido de Method Validation: https://www.qse-academy.com/es/finalidad-de-la-validacion-de-metodos-de-iso-17025/Determinación de iones en aguas termales de la región cafetera de Colombia mediante cromatografía de intercambio iónico *137*

Determination of ions in thermal waters of the coffee region of Colombia by ion exchange chromatography **138**

Determinación de las fracciones f libre de retroceso en ferritas $CuFe_2O_4$ mediante espectroscopía Mössbauer *139*

Determination of the recoilless f-fractions in $CuFe_2O_4$ ferrites using Mössbauer spectroscopy **139**

La sinergia de Microsoft Excel y la Química Física: Soluciona la ecuación de Van Der Waals con eficiencia *140*

The synergy of Microsoft Excel and Physical Chemistry: Solve the Van Der Waals equation efficiently **140**

Síntesis de complejos de coordinación derivados de ligandos azólicos con potencial actividad anti-plasmodium *141*

Synthesis of coordination complexes derived from azole ligands with potential anti-*plasmodium* activity **141**

Desarrollo de Aplicación para Solucionar la Ecuación De Van Der Waals Asistida por un Modelo de Lenguaje *142*

Development of an Application to Solve the Van Der Waals Equation Assisted by a Language Model **142**

Síntesis y Caracterización de $[Ag_2(DDTC)(Sac)]_n$ **143**

Synthesis and characterization of $[Ag_2(DDTC)(Sac)]_n$ **143**

Actividad Antihipertensiva *In Vitro* y Antioxidante Del Lulo Amazónico Cocona (*Solanum* sessiliflorum D.)

In vitro Antihypertensive and Antioxidant Activities Of The Amazonian lulo Cocona (Solanum sessiliflorum D.)

Cuéllar Álvarez, L.* [1], Paladines Beltrán, G.[1]

[1]Grupo de Investigación en Productos Naturales Amazónicos-GIPRONAZ, Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Universidad de la Amazonia, Florencia, Caquetá, Colombia.

li.cuellar@udla.edu.co

Área Temática: Química de Alimentos.

Palabras clave: Antihipertensivo, Antioxidantes, Compuestos fenólicos, Cocona, Frutos amazónicos.

Introducción: Según el informe de la Organización Mundial de la Salud (2022), sobre el monitoreo de los avances en relación con las enfermedades no transmisibles (ENT) 2022 en Colombia, el 76% de la mortalidad se debe a este tipo de enfermedades. Por lo tanto, el consumo de frutas y verduras ricas en compuestos fenólicos es una alternativa para prevenir el padecimiento de enfermedades no transmisibles como la hipertensión. La Cocona (*Solanum sessiliflorum* D.), es una especie de la región Amazónica, es cultivada en Perú, Colombia, Ecuador y Brasil. Su aroma y sabor tropical hacen que esta fruta sea apetecida por el consumidor. Sin embargo, la información limitada sobre las propiedades biofuncionales de esta especie, junto con el bajo aprovechamiento que hay a nivel local e internacional del fruto, hace que sea necesario explorar su funcionacionalidad frente a la prevención de ENT como la hipertensión. El objetivo de esta investigación consistió en evaluar las actividades antihipertensiva y antioxidante del extracto acuoso de frutos de la especie *Solanum sessiliflorum* D.

Metodología: Se usó la preparación de extractos acuosos, y posteriormente liofilizados de cocona, luego se analizaron midiendo la actividad inhibidora de la ECA-I, y la actividad eliminación del radical DPPH, y el contenido fenólico total.

Resultados y discusión: se encontró que el extracto acuoso de *Solanum sessiliflorum* D presentó una IC50 de (46.83%) frente a la actividad de la ECA-I *in vitro,* en contraste con el control positivo (lisinopril). Asimismo, referente a la actividad antioxidante se observó eliminación del radical DPPH (68.59%). En lo que respecta al contenido fenólico total, se encontró que el contenido (972.21 mg GAE/100 g) es comparable con la especie *Solanum quitoense*, perteneciente a la familia Solanaceae.

Conclusión: Nuestros resultados resaltan la utilidad potencial del extracto acuoso de la fruta amazónica cocona (*Solanum sessiliflorum* D) para la prevención de hipertensión.

Referencias

OMS, Organización Mundial de la Salud. (2022). Enfermedades No Transmisibles. Who.int. https://www.who.int/es/newsroom/factsheets/detail/noncommunicable-diseases.Consultado Junio 2023.Ramires S., Mosquera L.H., Martínez-Navarrete N.(2014). Optimization of spray drying conditions for lulo (*Solanum quitoense* L.) pulp. Powder Technology, 256, 233-238.

Valorizacion De Residuos De Espino Maulino *(Acacia Caven)* Y Avellana Chilena (*Gevuina Avellana)* Mediante La Obtención De Compuestos Fenólicos Con Poder Antioxidante Y Antimicrobiano Mediante Sistema De Ultrasonido

Valorization Of Waste Of Hawthwood (Acacia Caven) And Chilean Hazelnut (Gevuina Avellana) By Obtaining Phenolic Compounds With Antioxidant And Antimicrobial Power Using An Ultrasound System

Ramírez, Z.[1], Flores, M.[2], Ortiz-Viedma, J.[1], Vergara, C.[3]

[1]Departamento de Ciencia de los Alimentos y Tecnología Química, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile.

[2]Departamento de Horticultura, Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad de Talca, Campus Lircay, Talca, Chile.

[3]Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ciencias, Universidad Santo Tomás, Talca, Chile.

marcos.flores@utalca.cl

Área temática: Química de Alimentos-

Palabras clave: Avellana chilena (*Gevuina avellana*), Espino Maulino (Acacia Caven), compuestos bioactivos, extractos naturales.

El Espino Maulino y el Avellano Chileno crecen en el sur de Chile, el primero posee frutos que son vainas de color café oscuro, el segundo posee frutos esféricos negros. El espino se usaba con aplicaciones medicinales y el avellano para consumo de la población local. Sin embargo, ambos poseen partes que son subutilizadas. La valorización de estas materias primas ricas en compuestos polifenólicos permitiría el uso en la formulación de ingredientes funcionales. El objetivo de este trabajo fue evaluar la extracción de los compuestos bioactivos de los residuos de Espino Maulino (*Acacia caven*) y Avellana Chilena (*Gevuina avellana*) obtenidos a través del sistema ultrasonido. Este tipo de extracción se destaca por ser limpia sencilla, rápida y verde.

El proceso de extracción fue optimizado a través del estudio de los efectos de las variables tiempo de extracción (5, 15 y 25 min), proporción mezcla de solvente (0, 20 y 40 % v/v) y amplitud (20, 55 y 90).

El efecto de estas variables fue analizado mediante un estudio de superficie de respuesta en función del contenido de polifenoles totales. Los experimentos se realizaron a partir de residuo de una mezcla de cascara-semilla del espino en proporción (70:30) y de la avellana chilena (80:20). Tras encontrarse las condiciones óptimas de extracción para la mezcla espino maulino; tiempo 25 min, mezcla solvente 40% y amplitud 90 y para la mezcla de avellana chilena; tiempo 5 min, mezcla solvente 40% y amplitud 20, condiciones que fueron aplicada a la semilla, la cascara y la mezcla cáscara-semilla. Del extracto obtenido para la mezcla semilla: cáscara se obtuvo el contenido de polifenoles totales (mezcla espino 3411,06 mg EAG/100g y mezcla avellana 196,277 mg EAG/100g), capacidad antioxidante mediante el método ORAC (mezcla espino 503,88 umoles eq trolox/g y mezcla avellana 56,29 umoles eq trolox/g) método DPPH (mezcla espino264,26 umoles eq trolox/g y mezcla avellana 6,00 umoles eq trolox/g) y contenido de antocianinas (mezcla avellana 3,99 mg eq cya-3-glu/ml).

Finalmente se encontró que en la mezcla cascara-semilla, la cascara incrementaba la concentración de polifenoles totales y el valor de capacidad antioxidante de ambos extractos.

Referencias

Flores, M., Reyes-García, L., Ortiz-Viedma, J., Romero, N., Vilcanqui, Y., Rogel, C., Echeverría, J., Forero-Doria, O. (2021). Thermal Behavior Improvement of Fortified Commercial Avocado (*Persea americana Mill.*) Oil with Maqui (*Aristotelia chilensis*) Leaf Extracts. *Antioxidants*, 10(5), 664. https://doi.org/10.3390/antiox10050664

Ibarra Cabrera, C. A. (2018). Optimización del proceso de extracción por ultrasonido de polifenoles en grano, cuantificación y determinación de su capacidad antioxidante en materiales de cacao regionales de Nariño.

Proyecto FONDECYT 1230491

Determinación De Acrilamida En Bebidas De Café Arábigo (*C. arábica*), Variedad Catuaí Tostado Artesanalmente

Determination Of Acrylamide In Hand-Roasted Arabica Coffee (*C.arabica),* Catuaí variety

Fukalova Fukalova T.[1], Almeida A.[1], Alcívar C.[1], Sandoval G.[1]

[1]Facultad de Ciencias Químicas. Grupo de investigación en Fitoquímica y Productos Biológicos (grupo de Investigación FITOQUIM).

Universidad Central del Ecuador, Quito, Ecuador.

tfukalova@uce.edu.ec

Área Temática: Química de Alimentos.

Palabras clave: Acrilamida, Variedad Catuaí, Cromatografía de gases, *C. arábico*.

Sabor y aroma del café se desarrollan en el proceso de tueste de granos crudos por reacción de Maillard. En procesos térmicos, además de potencializar las cualidades organolépticas, pueden generarse subproductos no deseados como acrilamida (ACR). Es un potencial cancerígeno y las autoridades mundiales de inocuidad alimentaria recomiendan su control. Estudio tuvo por objetivo determinar la concentración de acrilamida (ACR) en café molido con diferentes tamaños de partícula, tostado artesanalmente.

La muestra experimental fue café arábigo de grano crudo, variedad *Catuaí* cosechado en la provincia Pastaza-Ecuador entre marzo-junio 2022. Se realizó un análisis sensorial comparando tres grados de tueste que fueron: claro (160°C), medio (190°C) y oscuro (225°C). El grado oscuro resultó de mayor aceptación por los consumidores. Con este grado se realizó una molienda y se obtuvo tres tamaños de partícula (extrafino, medio y grueso). Con cada tamaño se elaboró bebida café y se determinó ACR por cromatografía GC-ECD (Agilent 7683).

Los análisis morfológicos y fisicoquímicos se realizaron con granos crudos y tostados. El pH varió en tuestes medio (4,98) y oscuro (6,22). El porcentaje de humedad mostro una tendencia de reducción. La humedad mínima correspondió al tueste oscuro con 2,43%. El análisis sensorial reveló que en relación con la frecuencia del consumo de café el género masculino representó un 26,67% frente al femenino con 23,33%. En ambos géneros la aceptabilidad fue del tueste oscuro. El contenido de ACR en bebida café preparada con tres tamaños de partícula fue menor a 20 µg/kg.

La investigación permite concluir que parámetros morfológicos y fisicoquímicos, junto con los grados de tueste pueden proporcionar a los agricultores las herramientas de mejora de sus cosechas. El estudio sensorial mostró que el grado de tueste oscuro es de preferencia para el consumidor. Los resultados corroboraron con la hipótesis inicial de que la concentración de ACR en la bebida de café arábigo (*Coffea arabica* L.) de variedad Catuaí, tipo almendra no se ve influenciada por el tamaño de particula y su concentración no supera los límites establecidos.

Referencias

Aguilar Uscanga, B. R., Cavazos Garduño, A., Solís Pacheco, J. R., Sandoval Garcia, F., Navarro Hernández, R. E., & Serrano Niño, J. (2020). In vivo assessment of the protection conferred by β-glucans from Pleurotus ostreatus against the harmful effects of acrylamide intake (Part I). *Nutrición Hospitalaria*. https://doi.org/10.20960/nh.03001

E. F. S. A. (2015). Scientific opinion on acrylamide in food-EFSA panel on contaminants in the food chain (CONTAM). *The EFSA Journal*, *13*(6):4104. https://doi.org/10.2903/j.efsa.2015.4104

Mejora Del Comportamiento Termico De Aceite De Pepa De Zapallo No Refinado Adicionado De Ingredientes Culinarios

Improvement Of The Thermal Behavior Of Unrefined Pumpkin Seed Oil With Addition Of Culinary Ingredients

Vergara, C.[1], Flores, M.[2], Sánchez J.[3], Quitral, V.[4], Ortiz-Viedma, J.[5]

[1]Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ciencias, Universidad Santo Tomás. Talca, Chile.
[2]Departamento de Horticultura, Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad de Talca, Campus Lircay, Talca, Chile.
[3]Centro de Pomáceas, Universidad de Talca, Talca, Chile.
[4]Escuela de Nutrición y Dietética. Facultad de Salud. Universidad Santo Tomás. Santiago, Chile.
[5]Departamento de Ciencia de los Alimentos y Tecnología Química, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile.

claudiavergarava@santotomas.cl

Área temática: Química de Alimentos.
Palabras clave: aceite de zapallo, clavo de olor, merquén, compuestos polares, acidez, parámetros CIELAB.

Las semillas de zapallo son desechadas constantemente debido al desconocimiento de sus beneficios, sin embargo, a partir de su semilla se puede obtener aceite vegetal el cual contiene ácidos grasos monoinsaturados (41,7%), poliinsaturados 37,2%, ácido oleico 41,4% y ácido linoleico (37%), lo que lleva a considerarlo como un alimento funcional. Por otra parte, la medición objetiva del color es de gran importancia debido a las relaciones que existen entre dicho atributo y la aceptabilidad de los alimentos por parte de los consumidores y la medición de los compuestos polares (CP) representa un criterio de calidad del aceite comestible.

En el siguiente estudio se utilizaron muestras de aceite de zapallo obtenido por el método de prensado en frío, a las cuales se les adicionó merquén (Ma) y clavo de olor (Mb), 3% m/v cada uno, considerando además una muestra control sin aditivo (Mc). Las diferentes muestras fueron calentadas en estufa a 100 °C y monitoreadas por 45 días, controlando los CP por los sensores testo 270 y DOM-24, el índice de acidez (DOM-24), además de los parámetros del espacio de color CIELAB (L* a* y b*). Luego de 45 días los valores de CP aumentaron respecto al día 0 desde 15% a 37% en Mc, sin embargo, se obtuvo valores significativamente más bajos para Ma y Mb (31% y 27% respectivamente) en testo 270 y 33%, 26% y 22% respectivamente para DOM-24. Los parámetros CIELAB sufrieron modificaciones leves donde el factor mayormente afectado fue la luminosidad, L* la cual disminuyó un 20,57% en M_c al día 45, y aumentó en M_a y M_b un 3,50% y 2,01% respectivamente. El factor a* aumentó levemente en M_c y disminuyó para M_a y M_b y b* aumentó para M_a y M_c y disminuyó para M_b. La acidez aumento en todas las muestras siendo significativamente mayor en M_c. (0,72 a 4,03%).

Finalmente, M_a y M_b mostraron que al utilizar estos ingredientes culinarios se produce una mejora en la estabilidad térmica, luego del tiempo de análisis y el color se ve levemente afectado, lo cual favorece la calidad del aceite estudiado.

Referencias

Artica-Mallqui, L. Baquerizo-Canchumanya, M. Rosales-papa, H. y Rodríguez-Paucar, G. (2023) Physicochemical characteristics and fatty acid composition of squash, pumpkin and soybean oils, during heat treatment. Rev. Bio. Agro, 21 (2) 75-86. https://doi.org/10.18684/rbsaa.v21.n2.202302087

SantÁnna, V. Deyse Gurak, P. Ferreira Marczak, L. y Tessaro I.C. (2013). Tracking bioactive compounds with colour changes in foods – A review. Dyes and pigments 98 (3), 601-608. http://dx.doi.org/10.1016/j.dyepig.2013.04.011

Bio-Refinación De Compuestos Bioactivos De Alto Valor Funcional A Partir De Avellana Chilena (*Gevuina avellana*) Utilizando CO_2 Supercrítico Y Extracción Acelerada Con Solventes

Bio-Refining Of Bioactive Compounds Of High Funtional Value From Chilean Hazelnut (*Gevuina avellana*) Using Supercritical CO_2 And Accelerated Extraction With Solvents

Andrewartha, F.[1], Toledo, T[2], Barros-Velázquez, J.[2], Vergara, C.[3], Flores, M.[4], Cordero, K.[1], Romero, N[1], Lemus-Mondaca, R[1]., Ortiz-Viedma, J.[1]

[1]Departamento de Ciencia de los Alimentos y Tecnología Química, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile

[2]Departmento de Química Analítica, Nutrición y Ciencia de los Alimentos, Colegio de Farmacia/Escuela de Ciencias Veterinarias, Universidad de Santiago de Compostela, Santiago de Compostela, España

[3]Departament de Ciencias Básicas Facultad de Ciencias, Universidad Santo Tomas Talca, Chile.

[4]Departamento de Horticultura, Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad de Talca, Campus Lircay, Talca, Chile

maria.andrewartha@ug.uchile.cl

Área temática: Química de Alimentos.

Palabras clave: avellana chilena, extracción, termo-estabilidad, antioxidantes, extractos naturales.

La avellana chilena (*Gevuina avellana*) es una leguminosa nativa tradicional del sur de Chile que tiene bajo consumo y comercialización debido a ser poco industrializada, con lo cual gran parte del recurso se pierde. Esta investigación tuvo como propósito valorizar mezclas de descartes de semillas y cascaras de avellana mediante la obtención extractos bioactivos ricos en antioxidantes por métodos optimizados de Extracción en base a CO_2 Supercrítico (scCO2) y Líquidos Presurizados (PLE). El extracto lipídico fue caracterizado mediante tocoles y perfil de ácidos grasos como tocoferoles, ácidos grasos. Y el extracto hidrofilico con fenoles totales, antocianinas y capacidad antioxidante ORAC.

Las extracciones en dos etapas fueron extracción por scCO2 para obtener la fracción lipídica seguida de una segunda extracción a partir del residuo desgrasado por PLE con agua/etanol (70:30). Los resultados indicaron un rendimiento óptimo de extracción por scCO2 de 22,37% de aceite a 400 bar, temperatura 45°C y residuo semilla:cáscara (80:20). La comparación del aceite obtenido por $scCO_2$ en relación con el extraído por soxhlet fue semejante en el contenido de tocoles (108,97ppm vs 102,84ppm, respectivamente) y en el perfil de ácidos grasos monoinsaturado dado por ácido oleico (39,35% vs 39,79%, respectivamente) y palmitoleico (23,01% vs 21,43%, respectivamente).

La extracción hidrofilica por PLE obtuvo un valor máximo de 828,85 mg EAG/100g de polifenoles totales, siendo el óptimo de la extracción a 100 bar 75°C y solvente agua:etanol de 70:30 (v/v).

El extracto fenólico obtenido por PLE fue comparado con un extracto obtenido por ultrasonido. En este caso, el extracto obtenido por PLE mostró valores más altos de fenoles totales (828,85 vs 196,28mg EAG/100g) y antocianinas (5,57 vs 3,99 mg eq cya-3-glu/ml), Por otro lado, la actividad antioxidante medido por ORAC (95,64 vs 56,29 µmoles eq trolox/g).

Referencias

Ortiz-Viedma, J., Bastias-Montes, J. M., Char, C., Vega, C., Quintriqueo, A., Gallón-Bedoya, M., ... & Barros-Velázquez, J. (2023). Sequential biorefining of bioactive compounds of high functional value from calafate pomace (*Berberis microphylla*) using supercritical CO2 and pressurized liquids. Antioxidants, 12(2), 323.

Fraguela-Meissimilly, H., Bastías-Montes, JM, Ortiz-Viedma, JA, Tamarit-Pino, Y., Claret-Merino, M., & Araneda-Flores, J. (2024). Valorización de extractos de mezclas de biorresiduos de maqui (*Aristotelia chilensis*) y calafate (*Berberis microphylla*) mediante extracción con fluidos supercríticos y líquidos presurizados. Revista de Investigación Agrícola y Alimentaria, 15, 100950.

Proyecto FONDECYT 1230491

Aplicación De La Espectroscopia Infrarroja En La Adulteración De Cúrcuma Longa

Application Of Infrared Spectroscopy In The Adulteration Of Curcuma Longa

Cosco, G.[1], De Lama, G.[1], Pulache, F.[1], Rodríguez A. [1]

[1]Departamento de Química Analítica e instrumental. Facultad de Química e Ingeniería Química, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima, Perú.

gcoscos@unmsm.edu.pe

Área temática: Química de Alimentos.

Palabras clave: cúrcuma longa, adulteration, infrared spectroscopy.

La *cúrcuma longa* es una planta medicinal con mucha demanda debido a sus beneficios, actualmente el Perú exporta este producto alrededor del mundo, sin embargo, se ha visto desplazado en el mercado debido a su adulteración, por tanto, el objetivo del presente trabajo de investigación fue desarrollar herramientas de análisis multivariante para la identificación del anaranjado de metilo como adulterante en cúrcuma longa mediante espectroscopia infrarroja.

La metodología incluyó la preparación de muestras adulteradas a concentraciones de 1,5 %, 5,0%, 10,0%, 15,0% y 20,0% (w/w %) de adulterante por triplicado, se realizaron pruebas fisicoquímicas para caracterizar cada muestra y el efecto del adulterante, estas incluyeron: análisis de humedad, pH y porcentaje de oleorresina en cada muestra. En una segunda etapa, las muestras se analizaron en un espectrómetro Thermo scientific (Nicolet Is50 FT-IR) en la región infrarrojo medio, modo reflectancia total atenuada (ATR) para la construcción de curva de calibración y análisis multivariante.

Los resultados permitieron establecer una correlación entre los parámetros fisicoquímicos respecto al incremento del adulterante (anaranjado de metilo). Los espectros obtenidos presentan una banda ancha a 3271.09 cm^{-1} que se atribuye a la vibración de estiramiento fenólica O−H, una señal a 2930 cm^{-1} corresponde al estiramiento y la deformación de los alcanos, las bandas agudas en 1598.59 y 1510.84 cm^{-1} son vibraciones de estiramiento del enlace C=C del anillo de benceno y vibración de flexión olefínica del enlace C−H del benceno presente en la estructura de la curcumina; los picos en 1275.86 y 1148.27 cm^{-1} pertenecen al enlace CO de los grupos de ácidos carboxílicos.

La aplicación del análisis multivariante permitió establecer herramientas para identificar la adulteración de cúrcuma longa.

Referencias

Khatun, M., Nur, M., Biswas, S., Khan, M., Amin, M. (2021). Assessment of the anti-oxidant, anti-inflammatory and anti-bacterial activities of different types of turmeric (Curcuma longa) powder in Bangladesh. *J Agric Food Res*.1;6:100201. https://doi.org/10.1016/j.jafr.2021.100201

Rodriguez, L., Giusti, M., Shotts, M. (2016) *Advances in infrared spectroscopy for food authenticity testing*. *In: Advances in Food Authenticity Testing*. Woodhead Publishing; (pp. 71–116). https://doi.org/10.1016/B978-0-08-100220-9.00004-7

Estudio De Los Compuestos Activos En El Aroma De La Pitanga (*Eugenia uniflora L.)*

Odor Active Compounds Studies On The *(Eugenia uniflora L)* Pitanga Fruit Aroma

Rodríguez, S, García, J, Osorio, C
Departamento de Química, AA 11490, Universidad Nacional de Colombia sede Bogotá.

srodriguezpa@unal.edu.co; cosorior@unal.edu.co

Área Temática: Química de Alimentos.
Palabras clave: OAV, SAFE, GC-O, CG-MS.

Los estudios realizados en la química de aromas durante la última década han demostrado que solo un número muy limitado de los volátiles son responsables del aroma característico de las frutas y otros alimentos, los cuales se conocen como *odor active volatiles*. Es así como se realizó una extracción de la fruta pitanga (*Eugenia uniflora L.*, Myrtaceae) con diclorometano el cual se sometió a la técnica SAFE (*Solvent Assisted Flavor Evaporation)*, una destilación en frío con alto vació para obtener un extracto enriquecido en compuestos volátiles representativo del aroma a pitanga. Este extracto se analizó mediante GC-MS y GC-O (cromatografía de gases acoplada a olfatometría). Un análisis sensorial inicial permitió reconocer como notas olfativas importantes de esta fruta, las siguientes: dulce, frutal, terroso, verde entre otras. Por medio del método del estándar interno se determinó la concentración de los compuestos impacto en el aroma y se calculó su influencia en el aroma mediante el parámetro OAV (*Odor Activity Value*). Entre los compuestos con mayor OAV se identificaron: butanoato de etilo, *Z*-3-hexenal, 3-careno, nonanal, ácido acético, linalool y *β*-cariofileno.

Referencias

Gutiérrez, D., Sinuco, D. C., & Osorio, C. (2010). Caracterización de los compuestos volátiles activos olfativamente en uchuva (*Physalis peruviana* L.). *Revista Colombiana de Quimica*, *39*, 389–399.

Engel, W.; Bahr, W; Schieberle, P. (1999) Solvent assisted flavour evaporation-a new and versatile technique for the careful and direct isolation of aroma compounds from complex food matrices. *Eur. Food Res. Technol. 209*, 237-241. https://doi.org/10.1007/s002170050486.

FINANCIACION: División de Investigación y Extensión de Sede, Universidad Nacional de Colombia.

CLAQ 24 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Uso De NaDES Para La Extracción De Betalaínas En Semillas De Espinaca Como Solventes Listos Para Usar En La Formulación De Caramelos Duros

Use Of NaDES For The Extraction Of Betalains In Spinach Seeds as Ready-To-Use Solvents In The Formulation Of Hard Candies

Cedeño-Fierro, Valeria[1*], Sánchez-León, Ana M.[1], Grisales-Mejía, Juan Felipe[2], Torres-Castañeda, Harlen[1]

[1]Grupo de Investigación BIOMEV, Facultad de Ingeniería y Administración, Universidad Nacional de Colombia sede Palmira, Palmira, Colombia.

[2] Centro de Desarrollo Tecnológico Agroindustrial, Universidad Tecnológica de Pereira, Carrera 27 # 10 – 02, Pereira, Risaralda, Colombia.

[*] **vcedenof@unal.edu.co**

Área temática: Química de Alimentos.

Palabras claves: **Betalaínas, Química verde, Análisis sensorial, Aplicación, solventes listos para usar.**

Los solventes eutécticos naturales (NaDES) resultan de la mezcla de compuestos naturales que hacen las veces de aceptores y donadores de hidrógeno. Estas mezclas han demostrado múltiples beneficios, destacándose su baja toxicidad y su capacidad para ser utilizados como solventes listos para usar. En este estudio, se evaluó la inclusión de un extracto de betalaínas provenientes de semillas de espinaca en un NaDES basado en ácido cítrico y sacarosa, como una alternativa natural para la sustitución de colorantes sintéticos utilizados en la formulación de caramelos duros.

Las semillas de espinaca fueron lavadas, desinfectadas, liofilizadas, molidas y tamizadas. Posteriormente se realizó la selección de la relación molar del NaDES (1:1; 1:4; 1:10) a utilizar para la extracción betalaínas. La extracción fue realizada en un baño ultrasónico Branson operado a 42 kHz y la estimación del contenido total de betalaínas (Betacianinas [BE] y Betaxantinas [BX]) y Ácido betalámico [AB] se realizó por espectrofotometría (Jasco V750), siguiendo la metodología propuesta por Swamy, Sangamithra & Chandrasekar (2014). Se encontró que la relación 1:1 proporcionó el mayor rendimiento en extracción, con 54.73 ± 0.71, 33.82 ± 2.80 y 51.52 ± 5.04 mg de compuesto/g de muestra seca para BE, BX y AB, respectivamente.

El extracto obtenido fue incorporado en la formulación de un caramelo duro, al cual se le determinó la capacidad antioxidante frente al radical $ABTS^{+\cdot}$ y el contenido de BE, BX y AB. Además, se evaluó la acidez, el sabor dulce, el color y la aceptabilidad general del producto formulado en comparación con un control con colorante sintético mediante pruebas hedónicas.

Los resultados obtenidos evidenciaron la viabilidad de incluir extractos obtenidos con NaDES utilizando componentes que son al mismo tiempo ingredientes en la formulación de alimentos. Demostrando que estos solventes pueden ser vehículos de compuestos bioactivos, cumpliendo con determinadas características, como aportar color y evitar el uso de colorantes sintéticos.

Referencias

Choi, Y. H., van Spronsen, J., Dai, Y., Verberne, M., Hollmann, F., Arends, I. W. C. E., Witkamp, G. J., & Verpoorte, R. (2011). Are natural deep eutectic solvents the missing link in understanding cellular metabolism and physiology? Plant Physiology, 156(4), 1701–1705. https://doi.org/10.1104/pp.111.178426

Swamy, G. J., Sangamithra, A., & Chandrasekar, V. (2014). Response surface modeling and process optimization of aqueous extraction of natural pigments from Beta vulgaris using Box–Behnken design of experiments. Dyes And Pigments, 111, 64-74. https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2014.05.028

Estudio De La Cinética De Liberación De Capsaicina A Partir De Una Emulsión O/W Encapsulada En Perlas De Pectina

Study Of The Kinetics Of Capsaicin Release From An O/W Emulsion Encapsulated In Pectin Beads

Pérez, W.[1], Navarro, L.[2], Maldonado, H.[3], Ale, N.[4], Muñoz, P.[5], De Lama, G.[6], Tapia, N.[7]

[1, 2, 3, 4, 5, 6, 7] Grupo de investigación de obtención de geles a partir de biopolímeros y sus aplicaciones-FQIQ, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, FQIQ, Lima, Perú.

naleb@unmsm.edu.pe

Área temática: Química de Alimentos.

Palabras clave: Capsaicina, *Capsicum frutescens*, emulsiones, cinética.

La capsaicina es una sustancia bioactiva, que posee beneficios fisiológicos como antioxidante, antiinflamatorio, antimicrobiano, analgésico, anticancerígeno. Su naturaleza hidrofóbica y pungente dificulta su administración directa en diferentes aplicaciones, por lo cual es necesario suministrarla en emulsión y encapsulada en matrices biopoliméricas.

La sustancia en estudio se extrajo del ají charapita *Capsicum frutescens* por el método Soxhlet con solvente etanol. El extracto se mezcló con aceite de Sacha Inchi, la parte oleosa se separó y se agregó mediante agitación constante de 500 rpm a una solución de pectina desmetoxilada al 4% en la proporción de 1:4 p/p, la molécula de pectina es el emulsionante y además sirve para la encapsulación. La emulsión preparada se homogenizo en un equipo de homogenización a 14000 rpm por 3 minutos, luego utilizando una bomba peristáltica la emulsión se hizo gotear sobre una mezcla de una solución 0,2 M de $CaCl_2$ y alcohol al 96% en la relación 1:1 mediante agitación constante a 150 rpm utilizando un agitador magnético, la agitación se prolongó por 30 min. Las perlas obtenidas se lavaron y secaron en estufa a 40 °C durante 1h. Para el estudio de la cinética de liberación de la capsaicina se agregaron 5 g de perlas a 500 mL de una mezcla de alcohol-agua 3:1 y la cinética se siguió a través de la utilización de un equipo de UV/visible a una longitud de onda de λ=280nm.

Se obtuvo una emulsión O/W estable portadora de capsaicina, la proporción en exceso del biopolímero permitió encapsular directamente la emulsión, las perlas son consistentes y homogéneas, obteniéndose un resultado parecido en el caso de alginato. La cinética de liberación máxima se alcanza a los 100 minutos y se describe mediante el modelo de Korsmeyer-Peppas con una constante exponencial n=0.2242, la cual indica que el mecanismo de la cinética de liberación depende del proceso de difusión de la capsaicina desde la parte interna de las perlas.

Referencias

Wu, X., Xu, N., Cheng, C., McClements, D., Chen, X., Zou, L., Liu, W. (2022). Encapsulation of hydrophobic capsaicin within the aqueous phase of water-in-oil high internal phase emulsions: Controlled release, reduced irritation, and enhanced bioaccessibility. Food Hydrocolloids, 123, 107184.

Chan, E.-S. (2011). Preparation of Ca-alginate beads containing high oil content: Influence of process variables on encapsulation efficiency and bead properties. Carbohydrate Polymers, 84(4), 1267–1275.

Los autores agradecen al Vicerrectorado de Investigación y Posgrado de la UNMSM por el soporte financiero al proyecto C24072301, (2024) “Obtención de micro y nano emulsiones con capsaicina extraída de ají charapita (*Capsicum Frutences)* y su encapsulación en perlas de biopolímeros”

Efecto De La Adición De Extractos Carotenoides Obtenidos De Las Cáscaras De Cocona (*Solanum sessiliflorum*) Y Tumbo Serrano (*Passiflora tripartita* var. mollisima) Sobre Las Propiedades Y La Estabilidad De Color En Helados De Crema

Effect Of The Addition Of Carotenoid Extracts Obtained From The Shells Of Cocona (*Solanum sessiliflorum*) And Tumbo Serrano (*Passiflora tripartita* var. mollisima) On The Properties And Color Stability In Cream Ice

Calixto-Cotos, R.[1,2], Sarmiento-Achulli, F.[2]

[1]Departamento Académico Química analítica, Fac. de Química e Ingeniería Química, Universidad Nacional Mayor de San Marcos (UNMSM). Lima Perú

[2]Escuela de Ingeniería Agroindustrial, Fac. de Química e Ingeniería Química, UNMSM. Lima Perú

mcalixtoc@unmsm.edu.pe

Área Temática: Química de los alimentos

Palabras clave: Cáscara de cocona y de tumbo serrano, extracción de carotenoides, propiedades de color.

Actualmente se registran poca información de obtención de carotenoides cáscaras como naranja, sin embargo, no hay estudios que reporten obtención de carotenoides de las cáscaras de cocona y tumbo serrano para su aplicación en helados. El objetivo de presente investigación fue evaluar el efecto de la adición de extractos carotenoides (EC) obtenidos de las cáscaras de frutas de cocona (CC) (*Solanum sessiliflorum*) y tumbo serrano (CTS) (*Passiflora tripartita* var. mollisima) sobre las propiedades y la estabilidad de color en helados de crema.

Materiales: Frutas, betacarotenos, etanol y leche en polvo

Las cáscaras fueron secadas a 40 °C para su molienda. Los EC se obtuvieron por maceración con etanol y sonicación. Los EC fueron analizados °Brix, densidad, color y betacarotenos. Se adicionaron EC de CC (0.1, 0.2, 0.3 y 0.4%) y CTS (0.02, 0.06, 0.1y 0.2%) a los helados para evaluar el efecto sobre las propiedades y estabilidad de color.

Los EC de las CC y CTS tuvieron 6.99 % y 5.03 % de rendimiento, 22.83° y 19.40° Brix, 0.8141 y 0.8026 g/mL densidad, L*=21.95; a*=1.55; b*= 10.81 y L*=20.21; a*= 2.53; b*=12.41; 10.43 30.02 µg de betacaroteno/g cáscara respectivamente. La adición de EC tuvo efecto sobre las propiedades de color: A mayor concentración de EC disminuye (L*) y el (h°*), aumentando a*, b*, saturación (C*) y la estabilidad se logró determinar que la ΔE* aumenta el día 5 y 10.

Valores de ΔE fueron contrastados por Tesillo (2022), compara los zumos de naranja de 3 variedades con respecto al zumo de naranja con valores de ΔE= 5.29, 6.42, 4.16,

Los extractos presentaron betacarotenos con color evaluados en el sistema CIElab, Se evidencio que los EC pueden ser una alternativa para ser utilizados como colorantes en los helados.

Referencias

Rincón, A. M., Vásquez, M. A., & Padilla, F. (2005) Composición química y compuestos bioactivos de las harinas de cáscaras de naranja (*citrus sinensis*), mandarina (*citrus reticulata*) y toronja (*citrus paradisi*) cultivadas en Venezuela. *Archivos Latinoamericanos de Nutrición*, *55*(3).

Tesillo, M. (2022). Análisis y caracterización colorimétrica de zumos de naranja por espectrofotometría de reflexión y transmisión. [Tesis de pregrado, PUCP].

Obtención De Antioxidantes Naturales De Extractos De La Vaina Y Semilla Del Espino Maulino (*acaia caven*) Mediante SC-CO_2 y ASE Capaces De Inhibir La Oxidación De Diferentes Matrices Lipidicas Y Su Comparacion Con Metodos Tradicionales

Obtaining Natural Antioxidants From Extracts Of The Pod And Seed Of The Hawthhow (*acacia caven*) Using SC-CO_2 And ASE Capable Of Inhibiting The Oxidation Of Different Lipid Matrices And Their Comparison With Traditional Methods

Cordero, K.[1], Vergara, C.[2], Flores, M.[3], Toledo, T.[4], Barros-Velázquez, J.[4], Char, C[1]., Romero, N[1]., Lemus-Mondaca[1], R., Ortiz-Viedma, J.[1]

[1]Departamento de Ciencia de los Alimentos y Tecnología Química, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile

[2]Departamento de Horticultura, Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad de Talca, Campus Lircay, Talca, Chile

[3]Departament de Ciencias Básicas Facultad de Ciencias, Universidad Santo Tomas Talca, Chile.

[4]Departmento de Química Analítica, Nutrición y Ciencia de los Alimentos, Colegio de Farmacia/Escuela de Ciencias Veterinarias, Universidad de Santiago de Compostela, Santiago de Compostela, España

jaortiz@uchile.cl

Área temática: Química de Alimentos.

Palabras clave: termo-estabilidad, CO_2 supercrítico, sistema ASE, antioxidantes, extractos naturales.

La rancidez oxidativa deteriora los aceites y grasas, afectando sus propiedades organolépticas, nutricionales y su vida útil. La estabilidad oxidativa es fundamental para mantener la calidad de los lípidos. Últimamente han tomado relevancia los antioxidantes naturales versus los sintéticos. El objetivo de este trabajo fue obtener componentes bioactivos a partir del fruto del espino Maulino (*Acacia caven*) mediante métodos no contaminantes y evaluar su aplicación.

Se optimizó la extracción por fluido supercrítico (sc-CO2) y la extracción por solventes acelerados (ASE) realizando dos diseños de experimentos utilizando la vaina y semilla del espino secadas y molidas. Para el método sc-CO_2 se llevó a cabo un diseño de Box-Behnken con 15 experimentos, 3 variables independientes y con 3 niveles de trabajo; temperatura (35, 45, 55°C), presión (300, 350 y 400 bar) y mezcla vaina:semilla (10:90, 20:80 y 30:70%) y como variable respuesta el rendimiento de extracto lipídico y contenido de gamma tocoferol analizados por HPLC.

El residuo desgrasado resultante de la extracción del óptimo por sc-CO_2, se utiliza para la extracción por ASE en el diseño consistió en un factorial de 3 niveles 3^2 que considera 9 experimentos de extracción con 2 variables independientes: temperatura (25, 50 y 75°C), razón de solvente etanol:agua (0:100, 20:80 y 40:60%) y variable respuesta peso de extracto seco y contenido de fenoles totales.

Los resultados optimizados para la extracción sc-CO2 fueron temperatura 45°C, presión 400bar y razón vaina:semilla 30:70%. Para la extracción por ASE temperatura 75°C y razón de solvente etanol:agua 40:60%.

La fracción lipofílica de la vaina, semilla y la mezcla vaina:semilla para identificar, cuantificar y comparar tocoferoles, ácidos grasos, fenoles totales, carotenoides, contenido de taninos y propiedades antioxidantes por los métodos de ORAC, DPPH y antocianinas.

El residuo de las extracciones en condiciones óptimas del ASE, se recolectó y caracterizó. De los resultados obtenidos se evidencia que la semilla contiene mayor cantidad de tocoferoles en relación con la vaina y al contrario para el contenido de fenoles totales, donde la vaina presenta mayor cantidad y comparando con la mezcla de estas, se evidencia que la vaina incrementa la concentración de los fenoles totales.

Referencias

Flores, M., Reyes-García, L., Ortiz-Viedma, J., Romero, N., Vilcanqui, Y., Rogel, C., Echeverría, J., Forero-Doria, O. (2021). Thermal Behavior Improvement of Fortified Commercial Avocado (*Persea americana Mill.*) Oil with Maqui (*Aristotelia chilensis*) Leaf Extracts. *Antioxidants*, 10(5), 664. https://doi.org/10.3390/antiox10050664

Sánchez-Gómez, R., Sánchez-Vioque, R., Santana-Méridas, O., Martín-Bejerano, M., Alonso, G.L., Salinas, M.R., Zalacain, A. (2017). A potential use of vine-shoot wastes: The antioxidant,

antifeedant and phytotoxic activities of their aqueous extracts. *Industrial Crops and Products* 97, 120-127. https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2016.12.009

Proyecto FONDECYT 1230491

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Adaptación Del Método De Análisis De Carotenoides En Queso Americano Utilizando Extracción En Medio Neutro Y UHPLC-DAD

Correa-Suárez, M., Murillo, E., Molinar-Toribio, E.
[1]Universidad de Panamá, laboratorio de bioquímica de alimentos y nutrición (LABAN), Ciudad de Panamá, Panamá.

maricela.correa@up.ac.pa

Área temática: Química de Alimentos.
Palabras claves: Carotenoides, bixina, isómeros, queso, cuantificación.

El queso americano, ampliamente consumido en el mundo y en Panamá, posee un color amarillo característico, que se debe principalmente a los pigmentos del annatto, obtenido de la semilla de *Bixa orellana* L., conocida en Panamá con el nombre de achiote. La bixina (9´-*cis*-bixina) representa cerca del 80% de todos los carotenoides presentes en la semilla de achiote. La bixina, además de aportar la coloración al queso americano, aporta propiedades benéficas para la salud, como la reducción del azúcar en sangre, aspecto de beneficio para diabéticos. Se conoce que diferentes isómeros *cis/trans* de un carotenoide pueden poseer diferentes actividades biológicas, el *cis*-licopeno posee mayor actividad antioxidante y efecto preventivo del cáncer de la próstata, que el todo *trans*. El manejo durante el procesamiento de la muestra, el calor, los ácidos y la luz son factores que causan isomerización de los carotenoides. Los métodos tradicionales para determinar bixina en queso americano utilizan ácidos durante el análisis, induciendo la isomerización, esto no permite conocer los isómeros que hay en el queso cuando es consumido. En este estudio desarrollamos un método que evita la isomerización de bixina y otros carotenoides al prescindir de ácidos, minimizar la exposición a luz y el calor. Los carotenoides fueron extraídos por maceración, con acetonitrilo, adicionando dimetil-*trans*-crocetina como estándar interno. El extracto fue secado al vacío y desengrasado por extracción en fase sólida en cartuchos de silica gel 60. Los carotenoides en los extractos cetónicos se cuantificaron espectrofotométricamente a 422 y 487 nm y se analizaron por UHPLC-DAD. Con el método desarrollado se logró la extracción, identificación y cuantificación de los carotenoides de cuatro variedades de queso americano consumidos en Panamá, demostrando la presencia de carotenoides todo *trans* y algunos de sus isómeros presentes en los quesos al momento de ser consumidos.

Referencias

Bareth, A., Strohmar, W., & Kitzelmann, E. (2002). HPLC and spectrophotometric determination of annatto in cheese. *European Food Research and Technology*, *215*(4), 359–364. https://doi.org/10.1007/S00217-002-0541-Y

De Oliveira, T. T., Nagem, T. J., Da Costa, M. R., Da Costa, L. M., De Magalhães, N. M., Stringheta, P. C., De Lima, E. Q., De Moraes, G. H. K., & Da Silva Vieira, H. (2004). *Propiedades biológicas de los tintes naturales*. https://www.hml.repositorio.ufop.br/items/27bea473-6941-49c9-8acb-1846aad9dd33/full

Extracción De Pectina A Partir De La Cáscara De Cacao (*Theobroma cacao L.*) Para Su Aplicación En La Remoción De Cr (VI) En Medio Acuoso

Extraction Of Pectin From Cocoa Pod Husk (*Theobroma cacao L.*) For Application In The Removal Of Cr (VI) In Aqueous Medium

Jordan A. Aparicio-Huablocho[1], Bryan M. Córdova[1], Ronny G. Huamani-Palomino[1], Enrique Neira[2], Pedro Ramos M[1].

[1]Grupo de Biomateriales y Polímeros, Universidad Nacional de Ingeniería, Lima, Perú

[2]Facultad de Ingeniería Química y Textil, Universidad Nacional de Ingeniería Lima, Perú.

japaricioh@uni.pe

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola.

Palabras clave: Pectina, agentes extractantes, adsorción, cromo hexavalente, cacao.

Perú se ubica entre los principales exportadores de cacao, desencadenando un incremento en la producción y, lamentablemente, una proliferación de residuos. Estos desechos, al ser desestimados en vertederos, desencadenan una contaminación alarmante que perturba de manera significativa nuestro entorno. Este panorama contrasta abruptamente con la generalizada ignorancia acerca de los beneficios latentes de la mazorca de cacao, especialmente en lo que respecta a la pectina. En este contexto, la presente investigación se propone como objetivo primordial explorar la viabilidad de extraer pectina a partir de la cáscara de cacao (*Theobroma cacao L.*), proveniente de los residuos de la industria cacaotera de la Peca-Amazonas. Para alcanzar este propósito, se implementó un proceso de hidrólisis a 70 ºC durante 120 min, utilizando una solución 0.1 N de ácido clorhídrico, fumárico y cítrico como agentes extractantes. Las muestras obtenidas fueron caracterizadas en términos de rendimiento, peso equivalente, grado de metoxilo y contenido de AAG. Asimismo, fueron analizadas mediante la técnica de FT-IR, determinando el grado de esterificación (DE) en cada caso. La capacidad de adsorción de las muestras fue evaluada sobre una solución sintética de Cr (VI) de 100 ppm. El desarrollo del diseño experimental fue de 3x3x2, empleando variaciones en el pH (3, 4 y 5), dosis de pectina (2, 4 y 6 g/L) y tiempos de contacto (12 y 24 horas). Los resultados arrojaron conclusiones impactantes al exhibir pectinas de bajo DE (6.11 - 43.14 %), mediante deconvolución y validado con el método de titulación potenciométrica; siendo las de menor DE las de mayor adsorción, debido a la mayor cantidad de grupos carboxilo libres en su estructura los cuales favorecen la interacción electrostática con los iones metálicos divalentes y su capacidad de formar complejos ante la variación del pH. Resultando el ácido fumárico el mejor agente extractante para la formación de pectina de bajo DE (6.11 %).

Referencias

Guerrero, G., Suarez, D., & Orozco, D. (2017). Implementation of a method of extraction conditions of pectin obtained fromagroindustrial by-product cocoa husks. TEMAS AGRARIOS, 22(1), 85-90. doi:10.21897/rta.v22i1.919

Bravo, L. (2020). Efecto del pH en la adsorción de cromo hexavalente por la pectina de Citrus reticulata en soluciones sintéticas. Tesis de pregrado, Universidad Privada del Norte, FACULTAD DE INGENIERIA, Lima. Recuperado el 12 de Julio de 2023.

Cómo Ha Surgido El Estudio De Las Emulsiones, Y Su Paso A Las Pickering De Nanocelulosa: Un Análisis Bibliométrico

How Emulsion Studying Appearing And Its Change To Pickering Nanocellulose Emulsion: A Bibliometric Analysis.

Bernal, C.[1], García, E.[1], Rodríguez, K.[2,3]

[1]Universidad de Costa Rica, Sede del Caribe, Limón Costa Rica.

[2]Escuela de Química, Universidad de Costa Rica; San Pedro, San José.

[3]Unidad de Recursos Forestales, Instituto de Investigaciones en Ingeniería; Universidad de Costa Rica; San Pedro, San José

cesar.bernal@ucr.ac.cr

Área Temática: **Química Ambiental y Agrícola.**

Palabras claves: Emulsiones, nanocelulosa, pikering, agricultura,biomasa.

Las emulsiones son sistemas en los que se dispersan gotas de un líquido en otro, los cuales son normalmente inmiscibles entre sí. Se han clasificado de formas más complejas como emulsiones múltiples (W/O/W), y emulsiones estabilizadas por sólidos en la interfas.

Estas últimas, también conocidas como emulsiones Pickering son aquellas capaces de estabilizar emulsiones utilizando sólidos en la interfase, están enfocadas en mejorar propiedades como calidad, vida útil y funcionalidad de las emulsiones. La nanocelulosa al ser un nanomaterial natural, abundante, biodegradable, no tóxico y funcionalizable que se puede aislar de residuos ha llamado la atención como estabilizador de emulsiones ya que al utilizar el rastrojo de piña para obtener nanocelulosa y desarrollar emulsiones Pickering se proyecta como un método alternativo innovador de aprovechamiento de este residuo en contraste con los métodos actuales de tratamiento. Se realizó una búsqueda sistemática en la base de datos científica Scopus utilizando criterios de ecuaciones de búsquedas y utilizando los tipos de software VOSviewer versión 1.6.17 (Universidad de Leiden, Leiden,Países Bajos) y Vantagepoint versión 15.2. se demuestra que las publicaciones relacionadas a la formulación de emulsiones han existido desde 1865 de manera general hasta la actualidad, en donde la emulsiones Pickering a partir de nanocelulosa han presentado un incremento en el número de publicaciones a partir del año 2000 y siguen en aumento en la actualidad con aproximadamente 212 publicaciones generales y delimitándolo a solo a artículos serian 182 publicaciones, siendo actualmente china el País con mayor densidad de publicaciones y red de colaboraciones nivel mundial en relación con el tema. A pesar de que se han reportados trabajos de formulación de emulsiones Pickering a partir de nanocelulosa la mayoría se enfoca al área alimenticia de ahí nace la necesidad de investigar y estudiar este tipo de sistema para mejora el área agrícola en relación con la a liberación controlada de ingredientes activos que mejoren los sistemas productivos.

Referencias

Norde, W. (2011). Colloids and Interfaces in Life Sciences and Bionanotechnology. CRC Press.https://doi.org/10.1201/9781439873038

Lee, K. K., Low, D. Y. S., Foo, M. L., Yu, L. J., Choong, T. S. Y., Tang, S. Y., & Tan, K. W. (2021).Molecular dynamics simulation of nanocellulose-stabilized pickering emulsions.Polymers,13(4), 1–15.https://doi.org/10.3390/polym13040668

Método Multi-Residuo Para La Identificación Y Cuantificación De Pesticidas En Agua Superficial Por UHPLC/ESI-Q-Orbitrap-MS

Multi-Residue Method To Screening And Quantification Of Pesticides In Surface Waters By UHPLC/ESI-Q-Orbitrap-MS

Romero, A.[1], Gonzalez-Mateus, E.[1]
[1]Corporación Autónoma Regional de Cundinamarca, Bogotá, Colombia.

egonzalezma@car.gov.co

Área temática: Química Ambiental y Agrícola.
Palabras clave: pesticidas, LC/MS, monitoreo, agua, ambiental.

El aumento en la demanda de productos agroquímicos tipo pesticida ha conllevado a una creciente contaminación de las cuencas hidrográficas. En Colombia, se tiene un marco normativo que incluye el monitoreo de pesticidas, es por ello por lo que en el presente trabajo se implementó y validó una metodología para la determinación multirresiduo de pesticidas en agua utilizando cromatografia líquida de alto eficiencia acoplada a espectrometría de masas Q-*orbitrap*.

Para la identificación y cuantificación de pesticidas se usó un sistema de Cromatografía líquida UHPLC *Ultimate* 3000 (*Thermo Scientific*), acoplado a un espectrómetro de masas Q-Exactive (*Thermo Scientific*), con una interfaz de electro-nebulización (ESI). La separación de los analitos se realizó en una columna Raptor C18, 150 mm, L x 2,1 mm, I.D. x 2,7 µm. La obtención de los analitos se realizó por extracción en fase sólida (SPE), seguido de un ajuste de pH hasta 3.0 ± 0.1 con ácido fórmico y su correspondiente análisis cromatográfico, El flujo de la fase móvil fue de 0,3 mL/min y el volumen de inyección de 2 µL. La aguja ESI se operó a 250 °C, el voltaje del capilar se fijó en 3,5 kV.

Se validó un método analítico para la extracción, identificación y cuantificación inequívoca de más de 100 pesticidas en matrices de agua que tienen amplio uso en la industria colombiana. Los criterios de confirmación fueron la comparación de los tiempos de retención, el espectro de masas y el patrón isotópico del analito y el estándar certificado adquiridos mediante el modo *Data Independent Acquisition* (DIA). El método validado mostró buen desempeño para las pruebas de linealidad, repetibilidad, precisión, exactitud y recuperación.

Los resultados muestran que el modo de adquisición DIA es idóneo para realizar el *screening* y la adquisición simultánea en modo *full scan* se presentó como la mejor opción para realizar la cuantificación de más 100 pesticidas.

El cumplimiento de criterios de aceptación que normalmente la US EPA considera en sus métodos de referencia, demuestra que el presente método validado puede ser usado para el monitoreo de pesticidas en la verificación de la calidad del agua.

Referencias

Tudi M, Ruan HD, Wang L, Lyu J, Sadler R, Connell D, *et al*., (2021). Agriculture development, pesticide application and its impact on the environment. *Int J Environ Res Public Health,* 18(3), 1–24.

Wang, S. Y., Fodjo, E. K., Kong, C. y Yu, H. J. (2020). Multi-residue screening of pesticides in aquaculture waters through ultra-high-performance liquid chromatography-Q/Orbitrap mass spectrometry. *Water*, *12*(5), 1238.

Carbonizados Derivados Del Bagazo De Fique Para La Remoción De Metilparabeno

Methylparaben Adsorption Onto Carbonaceous Materials Derived From Fique Bagasse

Correa-Navarro Y. M.[1] Rivera-Giraldo J. D.[1] Murcia-García J. D.[1] Rodas-Rodríguez J. M.[2]

[1]Grupo de Estudios Ambientales en Agua y Suelo, Universidad de Caldas, Manizales, Colombia
[2]Grupo de Química Teórica y Bioinformática, Universidad de Caldas, Manizales, Colombia

yaned.correa@ucaldas.edu.co

Área temática: Química Ambiental y Agrícola.
Palabras clave: contaminantes emergentes; parabenos; adsorción; eliminación de microcontaminantes.

En las últimas décadas la población se ha incrementado, lo cual ha acrecentado la demanda de bienes y servicios provocando un aumento en el medioambiente de sustancias que pueden ser dañinas para los organismos vivos. Muchos de estos compuestos, conocidos como contaminantes emergentes, se encuentran en bajas concentraciones y carecen de normatividad o regulación ambiental. Dentro de estos contaminantes se encuentran los parabenos (alquil y aril ésteres del ácido *p*-hidroxibenzoico), los cuales son ampliamente usados como conservantes en las industrias farmacéutica, alimentaria y cosmética. El metilparabeno es el parabeno de mayor uso en aplicaciones comerciales, consecuentemente es el que se detecta con mayor frecuencia en los acuíferos, con concentraciones desde los ng/L hasta los µg/L.

Se han evaluado diferentes métodos para eliminar estos contaminantes del agua, dentro de estos la adsorción se ha reconocido como una buena alternativa, por su simplicidad, economía y eficiencia. Por otro lado, los materiales carbonosos han sido adsorbentes usados para la remoción de múltiples contaminantes desde un medio acuoso y han demostrado su potencial, la cual ha sido atribuida a las características fisicoquímicas del material y a la rápida y fácil adsorción de diferentes moléculas; además estos adsorbentes pueden ser obtenidos desde diferentes biomasas, lo cual ha incrementado el interés en estos.

En este trabajo se evaluó la adsorción del metilparabeno con materiales carbonizados obtenidos a partir de un residuo agroindustrial: el bagazo de fique. Con los sólidos adsorbentes se realizaron ensayos de remoción de metilparabeno bajo diferentes parámetros analíticos como: la concentración, el tiempo y el pH. Los resultados experimentales fueron evaluados con varios modelos cinéticos y de isotermas. Adicionalmente, se caracterizó teóricamente la interacción entre el metilparabeno y el material carbonizado, para lo cual se modeló la estructura tridimensional del material y se evaluaron diferentes conformaciones entre el parabeno y el material. Las interacciones fueron evaluadas usando criterios energéticos y geométricos.

Finalmente, los resultados obtenidos permitieron concluir que los materiales carbonizados presentaron porcentajes de remoción variable de metilparabeno, siendo el material activado con hidróxido de sodio el que presentó la mayor capacidad de adsorción.

Referencias

Bolujoko, N. B., Unuabonah, E. I., Alfred, M. O., Ogunlaja, A., Ogunlaja, O. O., Omorogie, M. O., & Olukanni, O. D. (2021). Toxicity and removal of parabens from water: A critical review. Science of the Total Environment, 792, 148092. https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2021.148092

León, G., Hidalgo, A. M., Martínez, A., Guzmán, M. A., & Miguel, B. (2023). Methylparaben Adsorption onto Activated Carbon and Activated Olive Stones: Comparative Analysis of Efficiency, Equilibrium, Kinetics and Effect of Graphene-Based Nanomaterials Addition. Applied Sciences (Switzerland), 13(16). https://doi.org/10.3390/app13169147

Evaluación De Contaminantes De Preocupación Emergente Y Genes De Resistencia A Antibióticos En El Río Mapocho (Chile): Un Estudio Exhaustivo Sobre La Calidad Del Agua Y El Impacto De Las Aguas Residuales Municipales

Assessment Of Contaminants Of Emerging Concern And Antibiotic Resistance Genes In The Mapocho River (Chile): A Comprehensive Study On Water Quality And Municipal Wastewater Impact

R. Salazar-González[1], J. Herrera-Muñoz[2], M. Ibáñez[3], W. Cazadilla[1], A. Cabrera-Reina[4], V. García[5], F. Hernández[3], M. Campos-Mañas[3], S. Miralles-Cuevas[4]

[1]Grupo de Investigación de Análisis, Tratamiento, Electroquímica, Recuperación y Reúso de Agua (WATER[2]), Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile

[2]Facultad de Química y Biología, Universidad de Santiago de Chile, USACH, Santiago, Chile.

[3]Environmental and Public Health Analytical Chemistry, Research Institute for Pesticides and Water (IUPA), University Jaume I, Avda. Sos Baynat s/n, 12071, Castellón, Spain.

[4]Instituto Universitario de Investigación y Desarrollo Tecnológico (IDT), Universidad Tecnológica Metropolitana, Ignacio Valdivieso 2409, San Joaquín, Santiago, Chile.

[5]Departamento de Ciencia y Tecnología de los Alimentos, Universidad de Santiago de Chile, Alameda 3363, Estación Central, Santiago Chile. Centro de Estudio en Ciencia y Tecnología de los Alimentos (CECTA-USACH). Obispo Manuel Umaña 050, Estación Central, Santiago, Chile.

ricardo.salazar@uc.cl

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola.

Palabras claves: Contaminantes emergentes, genes de resistencia a los antibióticos.

En los últimos años se ha demostrado la presencia de contaminantes emergentes en el medio ambiente. Aunque se encuentran en concentraciones de ng/L a µg/L, se ha demostrado que pueden generar genes de resistencia a los antibióticos (ARGs) y otros efectos ambientales nocivos, muchos de los cuales aún se desconocen.

En este estudio, se determinó la presencia de contaminantes emergentes utilizando cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas en muestras de agua de río Mapocho en Chile y la Planta de tratamiento de aguas que vierte las aguas tratadas. Las muestras fueron preconcentradas mediante extracción en fase sólida antes de su análisis. Además, se midieron diversos parámetros fisicoquímicos y microbiológicos. Para la detección de genes específicos asociados con la resistencia a los antibióticos fueron realizados ensayos PCR, con el propósito de monitorear estos marcadores genéticos.

Los resultados revelaron una diversidad significativa, con 73 CECs y genes de resistencia a antibióticos (ARGs) prevalentes, incluidos sulI, sulII, qnrB y blaTEM. La presencia de compuestos farmacéuticos, pesticidas y drogas de abuso, y ARGs en el río Mapocho se atribuyó a la descarga de efluentes.

Referencias

Nilsen, E., Smalling, K. L., Ahrens, L., Gros, M., Miglioranza, K. S. B., Picó, Y., & Schoenfuss, H. L. (2019). Critical review: Grand challenges in assessing the adverse effects of contaminants of emerging concern on aquatic food webs. *Environmental Toxicology and Chemistry* (Vol. 38, Issue 1, pp. 46–60). Wiley Blackwell. https://doi.org/10.1002/etc.4290

Rivas Ibáñez, G., Bittner, M., Toušová, Z., Campos-Mañas, M. C., Agüera, A., Casas López, J. L., Sánchez Pérez, J. A., & Hilscherová, K. (2017). Does micropollutant removal by solar photo-Fenton reduce ecotoxicity in municipal wastewater? A comprehensive study at pilot scale open reactors. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, *92*(8), 2114–2122. https://doi.org/10.1002/jctb.5212

Transformación Catalítica De Alcohol Fusel Utilizando Òxidos Metálicos Mixtos

Catalytic Transformation Of Fusel Oil Employing Mixed Metal Oxides

Orduña Ortega, J.,[1] Padilha de Lima, L.,[2] Mora Vargas, J. A.,[3] Boscolo, M.,[2] Metzker, G.[2]

[1]Grupo de Investigación en Electroquímica y Medio Ambiente, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad Santiago de Cali, Cali, Colombia.

[2]Grupo de Bioenergia, Instituto de Biociencias, Letras e Ciencias Exatas, Universidade Estadual Paulista, São Jose do Rio Preto, São Paulo, Brasil.

[3]Grupo de Síntese Orgânica, Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, São Paulo, Brasil.

julieth.orduna00@usc.edu.co

Área temática: Química Ambiental y Agrícola.

Palabras claves: **Alcohol fusel, hidrotalcitas, óxidos metálicos mixtos, productos de valor agregado.**

El alcohol fusel, es un subproducto considerado como un residuo compuesto por diferentes alcoholes de bajo peso molecular, obtenido en el procesamiento industrial de la caña de azúcar. Sin embargo, este subproducto representa una materia prima interesante a ser investigada, ya que puede transformarse catalíticamente en diversos compuestos de interés industrial. En este trabajo, se presenta su conversión catalítica en productos orgánicos de valor agregados utilizando óxidos metálicos mixtos (OMM) derivados de hidrotalcitas (HDL) como catalizadores. Para esto, la reacción se realizó en un reactor en flujo a presión atmosférica y temperaturas entre 500 °C y 600°C. Las HDLs estudiadas fueron sintetizadas mediante el método de coprecipitación sustituyendo 20 mol% de iones Mg^{2+} por diferentes metales de transición. Los OMMs fueron obtenidos después de la calcinación de las HDLs correspondientes. Una elevada conversión del alcohol fusel (hasta 98%) fue obtenida utilizando los diferentes catalizadores y una temperatura de reacción de 550°C a un flujo de 0.1 mL min^{-1}. El análisis de los productos condensados obtenidos proporcionó diferentes familias de compuestos orgánicos, tales como aldehídos, éteres, compuestos aromáticos (obtenidos utilizando un OMM modificado con cobre), alcanos y alquenos. Estos productos demuestran el potencial del alcohol fusel como fuente renovable de carbono capaz de producir importantes componentes orgánicos con una amplia gama de aplicaciones.

Referencias

Padilha de Lima, L., Mora Vargas, J. A., Roveda Jr. A. C., Orduña Ortega, J., Garcia da Silva, F., Cassaro, R. F., Cardoso, D. R., Boscolo, M., y Metzker, G (2024). From waste to raw chemicals: Catalytic transformation of fusel oil by mixed metal oxides. *Applied Catalysis B: Environment and Energy*, 351, 123985.

Mora Vargas, J., Morelato, L. H. T., Orduña Ortega, J., Boscolo, M. y Metzker, G. (2020). Upgrading 1-butanol to unsaturated, carbonyl and aromatic compounds: a new synthesis approach to produce important organic building blocks. *Green Chemistry*, 22, 2365-2369.

Transformación Catalítica De Alcohol Isoamílico Y Etanol Utilizando Òxidos Metálicos Mixtos Sustituidos Con Zn-Cu y Zn-Ni

Catalytic Transformation Of Isoamyl Alcohol And Ethanol Employing Mixed Metal Oxides Substitute With Zn-Cu and Zn-Ni

Briceño Lopez. N,[1] Orduña Ortega, J.,[1] Mora Vargas, J. A.,[3] Boscolo, M.,[2] Metzker, G.[2]

[1]Grupo de Investigación en Electroquímica y Medio Ambiente, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad Santiago de Cali, Cali, Colombia.

[2]Grupo de Bioenergia, Instituto de Biociencias, Letras e Ciencias Exatas, Universidade Estadual Paulista, São Jose do Rio Preto, São Paulo, Brasil.

[3]Grupo de Síntese Orgânica, Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, São Paulo, Brasil.

nicolas.bricen000@usc.edu.co

Área temática: Química Ambiental y Agrícola.

Palabras claves: **Alcohol isoamílico, hidrotalcitas, óxidos metálicos mixtos, catálisis heterogénea.**

El alcohol isoamílico es el componente mayoritario de una mezcla de alcoholes de bajo peso molecular conocido como fusel oil, este un subproducto considerado como un residuo que se obtiene en el proceso de producción del bioetanol. Sin embargo, este subproducto, en la actualidad, está siendo estudiado para diferentes usos como combustible alternativo para motores a diésel, disolvente en pinturas y como materia prima para la obtención de diferentes compuestos de interés industrial. En este trabajo, se presenta su conversión catalítica en productos orgánicos de valor agregados utilizando óxidos metálicos mixtos (OMM) sustituidos con Zn-Cu y Zn-Ni derivados de hidrotalcitas (HDL) como catalizadores heterogéneos. Las hidrotalcitas estudiadas fueron sintetizadas mediante el método de coprecipitación sustituyendo 20 mol% de iones Mg^{2+} y Al^{+3} por Zinc (Zn)/ Niquel (Ni) y Zinc (Zn)/Cobre (Cu). Los catalizadores de Óxidos Metálicos Mixtos fueron obtenidos después de la calcinación de las HDLs correspondientes. La conversión del alcohol isoamílico (mezclado con metanol) se realizó en un reactor en flujo a presión atmosférica y temperaturas entre 300 °C y 500°C, variando el flujo en 0.1 y 0.2 mL/min con el uso de los catalizadores sintetizados. El análisis de los productos condensados obtenidos proporcionó diferentes familias de compuestos orgánicos, tales como aldehídos, cetonas, compuestos aromáticos, alquenos (obtenidos utilizando un OMM modificado con cobre). Estos productos demuestran el potencial del alcohol isoamílico y el etanol como fuente renovable de carbono capaz de producir importantes componentes orgánicos, además, muestra la capacidad de los catalizadores de OMM para transformar estos alcoholes.

Referencias

Metzker, G., Vargas, J. A. M., & Boscolo, M. (2021). Heterogeneous catalytic ethanol transformation into chemicals: Some Brazilian contributions. In Advances in Inorganic Chemistry (Vol. 77, pp. 343–375). Academic Press Inc. https://doi.org/10.1016/bs.adioch.2021.02.005

Safieddin Ardebili, S. M., Solmaz, H., İpci, D., Calam, A., & Mostafaei, M. (2020). A review on higher alcohol of fusel oil as a renewable fuel for internal combustion engines: Applications, challenges, and global potential. In Fuel (Vol. 279). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.118516

Degradación Fotocatalítica De Acetamiprid Por Òxidos Mixtos De Titania-Sílice

Photocatalytic Degradation Of Acetamiprid By Titania-Silica Mixed Oxides

Penagos, N.[1,2], Salamanca, M.[1], Jaramillo-Páez, C.[2], Pabón, E.[1]

[1]Grupo de Investigación en Ciencia de Materiales Avanzados, Universidad Nacional de Colombia Sede Medellín, Medellín, Colombia.

[2]Grupo de Investigación en Química Aplicada a Procesos Ecológicos, Universidad del Tolima, Ibagué, Colombia.

npenagosj@unal.edu.co

Área temática: Química Ambiental y Agrícola.

Palabras clave: Acetamiprid, fotocatálisis, óxidos mixtos, sol-gel, TiO_2-SiO_2.

El acetamiprid es un insecticida neonicotinoide considerado un contaminante emergente, capaz de acumularse y persistir en suelos, ha sido detectado en fuentes de aguas superficiales, subterráneas y residuales, generando afectación a organismos no objetivo del medio. Por la capacidad del acetamiprid de permanecer en el medio es necesario evaluar alternativas para disminuir su concentración por procesos de biodegradación frecuentemente usados para el tratamiento de aguas, siendo de especial importancia los procesos de oxidación avanzada. La fotocatálisis con dióxido de titanio se ha estudiado en la degradación de compuestos orgánicos, en diversas condiciones experimentales debido a su baja toxicidad, insolubilidad en el agua, bajo costo, eficiente conversión de luz y estabilidad fotoquímica.

En este trabajo se sintetizó por ruta sol-gel asistida con tratamiento hidrotermal un óxido mixto de titania-silice de composición 90% de TiO_2, 10% SiO_2 incorporando Triton X-114 al sol precursor. Se usaron como precursores tetraetilortosilicato y tetraisopropóxido de titanio como fuente de silicio y titanio respectivamente. El gel fue sometido a tratamiento hidrotermal a 120 °C durante 48 h y posteriormente calcinado a 550°C por 2 h.

El óxido mixto se caracterizó por UV-Visible, FTIR, DRX, Raman y SEM. Por espectroscopia ultravioleta-visible se encontró un pico de absorción máxima de 369 nm y un band-gap aproximado de 3,3 eV. Se obtuvo una fase anatasa confirmada por DRX y Raman. La degradación se realizó en un reactor pyrex discontinuo, irradiado con una lámpara UVA (365 nm), con una dosis de catalizador de 0,5 g L^{-1} y una concentración de acetamiprid específica. Se tomaron alícuotas a intervalos de tiempo determinados y el seguimiento de la degradación se realizó utilizando HPLC-UV y la separación cromatográfica mediante elución isocrática con una fase móvil de agua y acetonitrilo.

El óxido mixto TiO_2-SiO_2 degrada eficientemente altas concentraciones de acetamiprid (10 mgL^{-1}) usando concentraciones bajas de fotocatalizador, indicando que los óxidos mixtos de titania-sílice son eficientes descontaminando las aguas de los contaminantes emergentes como los pesticidas tipo neonicotinoide.

Referencias

de Araujo, G. F., do Espírito Santo, D. G., Júnior, S. F. S., Correia, F. V., & Saggioro, E. M. (2024). Toxicological approaches as tool to assess the effects of a mixture of photocatalytic degradation products originated from the unregulated neonicotinoid acetamiprid employing a terrestrial organism (Eisenia andrei). *Science of The Total Environment*, *906*, 167271.

Swanson, L., Melathopoulos, A., & Bucy, M. (2024). Systematic review of residual toxicity studies of pesticides to bees and veracity of guidance on pesticide labels. *PeerJ*, *12*, e16672.

Catálisis Heterogénea Para La Valorización De Residuos De Café: Producción De Furfural, 5- Hidroximetilfurfural Y Ácido Levulínico

Heterogeneous Catalysis For The Valorization Of Coffee Waste: Furfural, 5-Hydroxymethylfurfural And Levulinic Acid Production

Suárez Suárez, K.[1,2], Guerrero Fajardo, C[2]., Cortes Ortiz, W.[1,2]

[1]Investigación en Química Aplicada (INQA), Universidad El Bosque, Bogotá, Colombia. [2]Aprovechamiento Energético de Recursos Naturales (APRENA), Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

krsuarez@unbosque.edu.co

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola

Palabras clave: Moléculas plataforma, biorrefinería, residuos de café, catálisis heterogénea.

Colombia en 2023 produjo 10,6 millones de sacos de café de 60 kg, siendo el segundo productor a nivel mundial. Esta producción genera grandes cantidades de biomasas residuales, las cuales pueden ser aprovechadas para la obtención de productos químicos de interés comercial. Con base en lo anterior, el presente trabajo se centra en la valorización de dichos residuos transformando sus azúcares estructurales en moléculas plataforma como furfural, 5-HMF y ácido levulínico, empleando catalizadores metálicos soportados en oxido de silicio.

En la primera fase de la investigación se realiza la recolección y caracterización de los residuos de cultivo de café. Posteriormente se lleva a cabo una hidrolisis con ácido nítrico 1%V/V mediante un diseño factorial 2^2, utilizando tiempos de 60 a 180 minutos y temperaturas de 60 a 120 °C. Con los hidrolizados obtenidos se evalúa la obtención de las diferentes moléculas plataforma mediante un nuevo diseño factorial 2^2donde las variables son el tipo de catalizador (VW/SiO_2-MoFe/SiO_2) y temperatura (160°C 180°C). En cada ensayo se utiliza 100 mg de catalizador y tiempos de reacción de 120 min. Tanto para la hidrolisis como para los ensayos catalíticos se utiliza un reactor discontinuo con atmosfera inerte y la separación, identificación y cuantificación de las moléculas plataforma se desarrolla mediante HPLC utilizando el método de patrón interno.

La biomasa caracterizada muestra un 79,09% de humedad, 20,91% de sólidos totales y 3,87% de cenizas. La hidrólisis ácida genera 11,44 mg de xilosa y 5,63 mg de glucosa a partir de un gramo de biomasa. Tras los procesos catalíticos, la producción de ácido levulínico alcanzó 38,78 mg/g de biomasa, siendo la más alta entre las moléculas obtenidas.

Se establece que los catalizadores bimetálicos como VW/SiO_2 y MoFe/SiO_2 al poseer sitios ácidos de Lewis participan activamente en pasos fundamentales en la obtención furfural, 5-HMF y ácido levulínico a través procesos isomerización y deshidratación de los carbohidratos presentes en la biomasa. Además de esto, se determina que los residuos de cultivo de café pueden ser implementados en la obtención de moléculas plataforma de alto valor agregado.

Referencias

Arias, K. S., Velty, A., Climent, M. J., & Iborra, S. (2024). Valorization of biomass platform molecules through one-pot cascade processes using heterogeneous catalysts. *Tetrahedron Green Chem*, 3(February), 100037. https://doi.org/10.1016/j.tgchem.2024.100037

Zhang, R., Zhang, W., Jiang, J., Xu, J., Wang, K., Feng, J., & Pan, H. (2024). Catalytic valorization of biomass carbohydrates into levulinic acid/ester by using bifunctional catalysts. *Renewable Energy*, 221(October 2023), 119851. https://doi.org/10.1016/j.renene.2023.119851

Obtención De Un Material Adsorbente A Partir De Biomasa Forestal Y Su Empleo En La Remoción De Plaguicidas

Obtaining An Adsorbent Material From Forest Biomass And Use For Pesticides Removal

Collazos, M.,[1] Sarria-Villa, R.[1], Gallo-Corredor, J.[1]

Grupo de Investigación en Química Analítica Ambiental (GIQA), Departamento de Química, FACNED, Universidad del Cauca, Cll 5 # 4-70, Popayán, Colombia

minicamc@unicauca.edu.co, rodrigosv@unicauca.edu.co

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola.

Palabras clave: Tiametoxam, adsorbente, taninos, material de taninos modificados, adsorción.

La producción agrícola en Colombia implica un uso generalizado de plaguicidas, siendo el Tiametoxam (TIA) uno de los más empleados causando un impacto negativo en la salud humana y el medio ambiente. Este estudio se centra en aprovechar los residuos de la corteza de *Pinus patula* para crear un material adsorbente capaz de eliminar el TIA del agua.

Materiales: corteza de pino, estándar tiametoxam, cromatógrafía líquida, espectrofotómetro infrarrojo.

Los taninos se extrajeron en medio básico a una temperatura de 80 °C, estos fueron usados en la síntesis del material de taninos mediante la reacción de esterificación con la implementación de un diseño experimental del tipo Box Behnken para un total de 27 experimentos, en el cual el porcentaje de rendimiento fue la variable respuesta. Se realizaron pruebas de adsorción del plaguicida tiametoxam sobre el material realizando el seguimiento de concentraciones empleando HPLC-UV.

La extracción de taninos tuvo un rendimiento del 36%. Las pruebas de adsorción del plaguicida tiametoxam con el material obtenido permitieron obtener un porcentaje de remoción del 70%, el proceso de adsorción del material obtenido se ajustó al modelo de Freundlich con una cinética de adsorción de Pseudo-segundo orden.

El material obtenido a partir de taninos de pino presentó una capacidad de adsorción de 33,112 mg/g, y el ajuste al isoterma de Freundlich permitió determinar que la superficie adsorbente es de tipo heterogénea. El empleo de materiales a partir de caña de azúcar y pino acacia han permitido obtener remociones del plaguicida tiametoxan del 80% y 90% respectivamente.

El material obtenido funcionó eficazmente para la retención de tiametoxan y la modificación química realizada permitió obtener recuperaciones superiores a las alcanzadas con materiales como la corteza de pino sin modificar que logró porcentajes de recuperación del 45%.

Referencias

Matos, T., et al. (2017a). Using Magnetized (Fe3O4 / Biochar Nanocomposites) and Activated Biochar as Adsorbents to Remove Two Neuro-Active Pesticides from Waters. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, *28*. https://doi.org/10.21577/0103-5053.20170042

Das, A. K., et al. (2020a). Review on tannins: Extraction processes, applications and possibilities. *South African Journal of Botany*, *135*, 58–70. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.sajb.2020.08.008

Optimización De La Degradación Del Colorante Negro Àcido 194 Mediante El Sistema Peroximonosulfato Activado Con Especies De Cobalto

Optimisation Of The Degradation Of The Dye Acid Black 194 Using The Peroxymonosulphate System Activated With Cobalt Species

Cardona, J.[1], Toro, A.[2], Ocampo, D.[3].

[1]Grupo de Investigación en Estudios Ambientales en Agua y Suelo, Universidad de Caldas, Manizales, Colombia. [2]Grupo de Investigación en Estudios Ambientales en Agua y Suelo, Universidad de Caldas, Manizales, Colombia, [3]Grupo de Investigación en Estudios Ambientales en Agua y Suelo, Universidad de Caldas, Manizales, Colombia.

julio.cardona_c@ucaldas.edu.co

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola.

Palabras clave: colorante, cobalto, peroximonosulfato, oxidación, optimización.

La industria textil es uno de los sectores económicos con mayor impacto ambiental en los recursos hídricos, debido al vertimiento de efluentes sin tratar o parcialmente tratados a las fuentes de agua superficial. Pequeñas concentraciones de colorantes (1 a 10 ppm) pueden contaminar grandes volúmenes de agua. Estos compuestos al absorber luz a distintas longitudes de onda afectan la actividad fotosintética de las algas, ocasionando un descenso en el contenido de oxígeno disuelto. Además, muchos colorantes y los subproductos de su degradación pueden ser carcinogénicos, mutagénicos y/o tóxicos para la vida acuática. Los procesos de oxidación avanzados (POAs), son una alternativa para la degradación de una gran variedad de contaminantes recalcitrantes. La oxidación puede estar basada en la generación de radicales sulfatos (SO_4•−) que presentan un potencial redox comparable con el radical hidroxilo (HO•), y que por medio de la activación catalítica de oxidantes como el peroximonosulfato (PMS) con metales de transición (cobalto, Co), mejoran la velocidad de oxidación de contaminantes orgánicos como los colorantes azoicos, en este caso el negro acido 194 (NA194).

Los ensayos de oxidación se realizaron en medio homogéneo con un reactor batch de 500 mL, adicionando el colorante NA194 en diferentes concentraciones, luego las especies de cobalto (Co^{2+}) y posteriormente el (PMS) en relaciones estequiométricas teóricas. La optimización se llevó a cabo por metodología de superficie de respuesta (MSR) donde se evaluaron las variables: concentración de Co^{2+}, concentración de PMS y concentración de NA194. Como variables respuesta se analizaron la decoloración (%) y la mineralización (%).

Se determinaron concentraciones óptimas de Co^{2+} (13.51 μM) y PMS (4.71 mM), con porcentajes de decoloración de hasta el 98% y mineralizaciones del 41%, para una concentración de NA194 de 35 mg/L. El sistema Co^{2+}/PMS, muestra ser una alternativa eficiente en la degradación de colorantes orgánicos recalcitrantes. El diseño experimental y la MSR permitieron identificar las condiciones operacionales óptimas del POAs estudiado, contribuyendo al desarrollo de tecnologías útiles para el tratamiento de aguas residuales en la industria textil.

Referencias

Barrios-Ziolo, L. F., Gaviria-Restrepo, L. F., Agudelo, E. A., & Cardona-Gallo, S. A. (2015). Technologies for the removal of dyes and pigments present in wastewater. A review. *DYNA (Colombia)*, *82*(191), 118–126. https://doi.org/10.15446/dyna.v82n191.42924

Ma, D., Yi, H., Lai, C., Liu, X., Huo, X., An, Z., Li, L., Fu, Y., Li, B., Zhang, M., Qin, L., Liu, S., & Yang, L. (2021). Critical review of advanced oxidation processes in organic wastewater treatment. In *Chemosphere* (Vol. 275). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.130104

Efecto De Aluminio En Daño Oxidativo Y Sistema Antioxidante En Caña (*Saccharum officinarum*) Bajo Condiciones De La Amazonia Colombiana

Effect Of aluminum On Oxidative Damage And Antioxidant System In Sugarcane (*Saccharum officinarum*) Under Conditions Of The Colombian Amazon

Paladines, G.M[1], Suarez, J.C[2], Venegas, N[1], Vanegas, I[2]

[1]Grupo de investigación en Productos Naturales Amazónicos GIPRONAZ, Universidad de la Amazonia, Florencia-Caquetá, Colombia.

[2]Grupo de investigación Agroecosistemas y conservación en Bosques Amazónicos GAIA, Universidad de la Amazonia, Florencia-Caquetá, Colombia.

g.paladines@udla.edu.co

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola.

Palabras claves: Aluminio, estrés oxidativo, *Saccharum officinarum*, antioxidantes.

El aluminio (Al) es una de las limitaciones más importante en la producción agrícola, a pH bajos, el Al aumenta su solubilidad y reacciona con muchos sitios de las células, modificando su metabolismo y alterando el estado redox de los componentes celulares, aumentado la producción de especies reactivas del oxígeno (ERO) y desencadenando el estrés oxidativo. La caña es comercialmente aprovechada para la producción de azúcar, etanol y biocombustible en las regiones tropicales y subtropicales, abasteciendo el 70 % de azúcar y alrededor de 25 mil millones de litros de etanol en el mundo, por lo que juega un rol importante en la economía mundial. Es por ello, que esta investigación se centró en evaluar el efecto del aluminio en el contenido de pigmentos fotosintéticos y sistema de defensa antioxidante en caña.

El establecimiento de las plantas de caña se realizó en el Centro de Investigaciones "CIMAZ - MACAGUAL" usando la variedad CC 01-1940, en un diseño de bloques con tratamiento al azar de $AlCl_3$ (0, 25, 50, 75 y 100 $mg*kg^{-1}$). Los muestreos de tejido foliar se realizaron a 0, 3, 6, 9, 12, 24, 48 y 96h después de aplicado los tratamientos. Se evaluó el contenido de pigmentos fotosintéticos, MDA, prolina y sistema antioxidante enzimático (CAT, APX, SOD, GR) y no enzimático (GSH). A todos los resultados se les realizó un análisis de modelos lineales, generales y mixtos, con comparaciones de DGC, componentes principales y correlación de Pearson en Infostat.

Los resultados mostraron que los tratamientos 50 y 75 $mg*kg^{-1}$ generaron mayor estrés oxidativo a las 3 y 6 h con un aumento significativo de MDA (0,39umolMDA$*g^{-1}$), además, se observó una degradación de los pigmentos fotosintéticos con diferencias significativas con respecto al control, lo que sugiere un daño fisiológico y disminución en la eficiencia fotosintética, así mismo, se encontró un alto contenido de prolina a las 12h (28,28 ugpro$*g^{-1}$) y activación de sistema de defensa antioxidante, con mayor respuesta de GSH (8,81 umol$*g^{-1}$), APX y CAT (44,30 y 853 umol*min mgproteina, respectivamente).

Referencias

Sharma, P., Sharma, P., Arora, P., Verma, V., Khanna, K., Saini, P. y Bhardwaj, R. (2019). Papel y regulación de ROS y antioxidantes como moléculas de señalización en respuesta al estrés abiótico. En *Moléculas de señalización vegetal* (págs. 141-156). Publicación Woodhead.

Singh, S., Tripathi, DK, Singh, S., Sharma, S., Dubey, NK, Chauhan, DK y Vaculík, M. (2017). Toxicidad del aluminio en varios niveles de células y organismos vegetales: una revisión. *Botánica Ambiental y Experimental* , *137* , 177-193.

Reducción Electroquímica Del Dióxido De Carbono Sobre Electrodos De Cobre Modificados Con Co/Cu Para La Obtención Selectiva De Metanol.

Electrochemical Reduction Of Carbon Dioxide On Copper Electrodes Modified With Co/Cu For Selective Methanol Production.

Parra, W., Cuervo, G., Gutiérrez, T., Vera, L.
Grupo de investigación en procesos electroquímicos, Universidad del Cauca, Popayán, Colombia.

williamparrabob@unicauca.edu.co

Química Ambiental y Agrícola.

Palabras clave: CO_2, electroreducción, electrodeposición, cambio climático.

La quema de combustibles fósiles es la principal causa del aumento de emisiones de dióxido de carbono en la atmosfera y para el 2023 se ha registrado 38,6 Gt a nivel mundial que provocan una serie de problemas medioambientales como el calentamiento global. Por ello, se utilizó un método electroquímico para reducir el CO_2 a productos químicos de interés comercial como el metanol.

Inicialmente, se realizó la modificación de electrodos de cobre mediante electrodeposición de un segundo metal (Cu, Hg, Zn, Ni, Ag, Co y Pt), con el fin de seleccionar los de mayor eficiencia en la electroreducción del CO_2. Posteriormente, se repitió el proceso con mezclas de los dos metales que mostraron mejor desempeño, variando sus fracciones molares. El electrodo modificado se utilizó como electrodo de trabajo en una celda que contenía solución electrolítica de $NaHCO_3$, burbujeando CO_2 hasta saturación. El proceso de reducción se llevó a cabo usando un potenciostato/galvanostato PGSTAT204 con la técnica de cronoamperometría. La identificación del metanol se realizó mediante voltamperometría cíclica y para su cuantificación, se empleó cromatografía de gases con detector de ionización de llama (FID).

La identificación de metanol mediante la voltamperometría cíclica dio como resultado una señal característica en el rango de 0.8 a 1.1 V. Con estos resultados se pudo determinar la mezcla de los dos metales empleados como recubrimiento que presentaron mejor desempeño en la reducción de CO_2. Adicionalmente, se evaluaron los parámetros que afectan tanto la electrodeposición de los metales para recubrimiento del electrodo como de reducción de CO_2 sobre el mismo electrodo. Para la primera se aplicó un diseño experimental factorial 2^k con k = 3, donde los parámetros evaluados fueron: tiempo de electrodeposición, corriente y concentración y mientras que la variable respuesta fue el área de la señal de metanol obtenida mediante cromatografía de gases – FID. Para la segunda parte se evaluó el tiempo de reducción, potencial aplicado y pH de la solución.

Los resultados mostraron la generación de metanol como producto principal a partir de la reducción de CO_2 obteniendo una concentración entre 0,0131 y 0,0565 M.

Referencias

Hussain, I., Alasiri, H., Ullah Khan, W., & Alhooshani, K. (2023). *Advanced electrocatalytic technologies for conversion of carbon dioxide into methanol by electrochemical reduction: Recent progress and future perspectives. In Coordination Chemistry Reviews (Vol. 482). Elsevier B.V.* https://doi.org/10.1016/j.ccr.2023.215081

Distribución De Microplásticos En Litorales De Las Playas Del Caribe Colombiano

Distribution Of Microplastics On The Shores Of Colombian Caribbean Beaches

Trilleras, J.[1], Arana, V.A.[2], Ayala, J.[2], Santos A.[3], Medina J.[3]

[1]Grupo de Investigación en Compuestos Heterocíclicos, Universidad del Atlántico, Puerto Colombia, Colombia.

[2]Grupo de Investigación en Ciencias, Tecnología y Educación-CETIC, Universidad del Atlántico, Puerto Colombia, Colombia.

[3]Grupo de Investigación Estudios Ambientales del Caribe, Universidad Nacional de Colombia – sede Caribe, San Andrés, Colombia

jorgetrilleras@mail.uniatlantico.edu.co

Área Temática: **Química Ambiental y Agrícola.**

Palabras clave: **Microplásticos, contaminación, ecosistemas marinos, sedimento, polimeros.**

Los microplásticos-MPs, contaminantes presentes en los ecosistemas marinos, causan daños ambientales, económicos, sociales y culturales. Se evalúo la contaminación por MPs en playas turísticas del departamento del Magdalena, región Caribe al norte de Colombia. Se recolectaron muestras de sedimento en zonas litorales: infralitoral, mesolitoral y supralitoral, y en dos temporadas climáticas: alta y baja precipitación, para determinar los efectos en la contaminación por MPs.

La extracción de MPs con tamaño >500 µm, se realizó por tamizado, digestión con H_2O_2-30%, y filtración. Los MPs se contaron y clasificaron según su tipología, color y tamaño. La identificación de los polímeros se efectuó mediante µATR-FTIR.

La abundancia media de MPs fue de 164,7 ± 31,6 MPs/kg en sedimento seco, predominando las fibras (52%), el color azul (29%) y los tamaños <1 mm (54%). Los principales polímeros identificados fueron poliéster, polipropileno, poliuretano y mezclas poliéster-algodón.

No hubo diferencias significativas en la abundancia de MPs entre las playas, pero sí entre zonas litorales y las temporadas, siendo el supralitoral y la temporada de baja precipitación las que presentaron mayor contaminación por MPs.

Referencias

Garcés-Ordóñez, O., Castillo-Olaya, V. A., Granados-Briceño, A. F., Blandón-García, L. M., Espinosa-Díaz, L. F. (2019). Marine litter and microplastic pollution on mangrove soils of the Cienega Grande de Santa Marta, Colombian Caribbean. *Marine Pollution Bulletin*, *145*, 455–462. https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2019.06.058.

Rangel-Buitrago, R., Arroyo-Olarte, H., Trilleras, J., Arana, V.A., Mantilla-Barbosa, E., Garcia C., A., Velez Mendoza, A., Neal., W.J., Williams, A.T., Micallef, A. (2021). Microplastics pollution on Colombian Central Caribbean beaches. *Marine Pollution Bulletin*, *170*, 112685. https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2021.112685.

Montaje Y Operación De Composteras Autónomas Para El Aprovechamiento De Residuos

Mount And Operation Of Autonomous Composters For The Use Of Waste

Cuasapud, Y.[1], Pérez, E.[1] Delgado, D.[2]
[1]Grupo de Investigación en Agroquímica, Universidad del Cauca, Popayán, Colombia.
[2]Grupo de Investigación Semillero Autónomo en Desarrollo Sostenible, Corporación Universitaria Autónoma del Cauca, Popayán, Colombia.

johamercy@unicauca.edu.co

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola.
Palabras clave: Compostaje, Compost, Gestión de residuos, Calidad, Ambiente.

El compostaje es una alternativa sostenible que implementa residuos sólidos (RS) como materia prima, parte del proceso implica la actividad microbiana que los transforma en material de enmienda para suelos. Con el crecimiento poblacional, se incrementa la generación de RS que en muchos lugares llegan a los rellenos sanitarios sin ser tratados adecuadamente, afectando a las comunidades y generando contaminación al ambiente y malestar en la población. En este estudio se presentan los resultados del montaje y operación de un sistema autónomo de compostaje (SAC) que permiten reducir el tiempo de compostaje, para aprovechar los residuos orgánicos generados por una comunidad local cultivadora de café. Para el montaje se adecuo el sitio de instalación de composteras, se realizó la recolección y separación de los residuos orgánicos y la posterior conformación de la mezcla de RS a compostar, C1 con una relación C/N calculada de 40, C2: 3:1 pulpa de café/aserrín de madera y C3 una relación 3:1 residuos orgánicos/aserrín de madera. En la operación se midieron los parámetros temperatura, pH, humedad, %C tomando muestras el día 1, 8, 15, 30 y 60 del proceso.

Los parámetros evaluados indicaron que la etapa termófila comienza en menor tiempo del convencional, al día 3 subió la temperatura hasta 65°C, siendo esta etapa crucial en el proceso de compostaje, acelerando el proceso de descomposición del material orgánico y eliminando microrganismos patógenos del compost. Por otro lado, el pH se mantuvo en un rango de 7 – 8, lo que indica que no hubo problemas de acidez durante el proceso que favoreció la actividad microbiana. También se determinó el %C, que muestra una perdida considerable durante los primero 8 días, y durante la etapa de compostaje disminuye gradualmente, indicador de un buen proceso humificador del material orgánico. El compostaje es una herramienta útil para gestionar RS y las composteras SAC son eficiente a la hora de controlar parámetros como la temperatura y humedad sin necesidad de realizar volteos periódicos.

Referencias

Liu, Z., Wang, X., Li, S., Bai, Z., & Ma, L. (2022). Advanced composting technologies promotes environmental benefits and eco-efficiency: A life cycle assessment. Bioresource Technology, 346. https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960852421019180?via%3Dihub

Isotermas Y Cinética De Adsorción De Cr^{3+}, Cr^{6+}, Hg^{2+}y Pb^{2+} En Fibra Natural Biosorbente

Isotherms And Adsorption Kinetics Of Cr^{3+}, Cr^{6+}, Hg^{2+} and Pb^{2+} In Natural Biosorbent Fiber

Parra Reyes, J. A.[1], Pérez, E. H.[1]
[1]Grupo de Investigación en Agroquímica, Universidad del Cauca, Popayán, Colombia.
jparrar@unicauca.edu.co

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola.
Palabras clave: **Fique; Biosorción; Especies metálicas.**

Como alternativa ambientalmente sostenible para la retención y depuración de metales pesados presentes en aguas, se evaluó la capacidad máxima y la cinética de adsorción de los residuos de fique (*Furcraea sp.*) en la remoción de metales pesados (Cr^{3+}, Cr^{6+}, Hg^{2+} y Pb^{2+}), empleando la técnica espectrofotométrica de absorción atómica (AAS).

Reactivos: Cloruro de cromo (III) hexahidratado, Oxido de cromo (VI), Cloruro de mercurio (II), Nitrato de plomo.

Equipos: Espectrofotómetro de Absorción Atómica Thermo Solaar 5 series S4SN71203.

Los residuos de fique se adecuaron, caracterizaron y mediante la técnica analítica estandarizada AAS, se optimizaron los procesos de adsorción de los metales (Cr^{3+}, Cr^{6+}, Hg^{2+} y Pb^{2+}). Se implementó el diseño experimental de Plackett-Burman y Box-Benken para determinar la capacidad máxima de adsorción y variaciones de tiempo para determinar su influencia en el proceso de biosorción.

Los resultados obtenidos muestran que los analitos biosorbidos en la fibra de fique presenta una buena capacidad de adsorción de 123,81 mg/g para Cr^{3+}, 2,56 mg/g para Cr^{6+}, 8,60 mg/g para Hg^{2+} y 125,37 mg/g para Pb^{2+}. Así mismo se observa que para los analitos Cr^{3+}, Hg^{2+} y Pb^{2+} el modelo cinético que mejor se ajustó fue el de Elovich, mientras que para Cr^{6+}, el modelo que mejor describe su biosorción fue el modelo de Pseudo-primer orden.

Los resultados obtenidos muestras que las especies analíticas biosorbidas se ajustan a los modelos de Freundlich y Sips que explican procesos de biosorción multicapa en superficies heterogéneas con capacidades máximas de adsorción entre 2,56 y 125,37 mg/g. El modelo cinético de Elovich encontrado para los analitos Cr^{3+}, Hg^{2+} y Pb^{2+} indica que hay quimisorción de estos metales en la fibra de fique, mientras que para Cr^{6+}, el modelo de Pseudo-primer orden indica que hay interacciones de fisisorción entre los sitios activos de la fibra y el metal.

Los datos experimentales obtenidos en este estudio muestran que el residuo agroindustrial de fique tiene un alto potencial para ser utilizado en los procesos de biosorción de las especies metálicas estudiadas, lo cual puede ser una evidencia relevante en aspectos ambientales para el tratamiento de aguas.

Referencias

Adeniyi, A. G., & Ighalo, J. O. (2019). Biosorption of pollutants by plant leaves: An empirical review. Journal of Environmental Chemical Engineering, 7(3), 103100. https://doi.org/10.1016/j.jece.2019.103100

Xu, K., Li, L., Huang, Z., Tian, Z., & Li, H. (2022). Efficient adsorption of heavy metals from wastewater on nanocomposite beads prepared by chitosan and paper sludge. Science of the Total Environment, 846(July), 157399. https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2022.157399

Procesos De Adsorción De Fósforo Y Magnesio En Residuo Del Procesamiento De Fique Como Un Posible Uso De Biofertilizante

Phosphorus And Magnesium Adsorption Processes In Fique Processing Waste As A Possible Use Of Biofertilizer

Fuli Arcos, J.H.[1], Perez, E.H.[1], Salamanca Santiago, D.A.[1], Parra Reyes, J.A.[1]
[1]Grupo de Investigación de Agroquímica, Universidad del Cauca, Popayán, Colombia.
jhfuli@unicauca.edu.co

Química Ambiental y Agrícola

Palabras claves: Fique; Magnesio; Fósforo; Adsorción

Las fibras naturales han recibido gran atención por su reciclabilidad, disponibilidad y respeto al medio ambiente, en Colombia la *Furcraea sp*. de la que es extraída la cabuya, es un material que puede ser modificado por su composición y obtener un nuevo producto con un valor agregado que sea amigable con el medio ambiente, como posibles enmiendas de suelo.

Las plantas en general necesitan 16 nutrientes esenciales, 13 que provienen del suelo. El Fósforo (P) afecta la fertilidad del suelo disminuyendo la rentabilidad de los cultivos, generando una aplicación continua de fertilizantes minerales no renovables, El Magnesio (Mg) está presente en el suelo del 90 a 98% en forma no disponible para ser absorbido por las plantas.

Reactivos: Cloruro de Magnesio Hexahidratado, Fosfato de Potasio Dibásico.

Equipos: Espectrofotómetro de Absorción Atómica Thermo Solaar 5 series S4SN71203 y espectrofotómetro UV-Vis marca Genesy

Se optimizaron las variables que influyeron significativamente en la adsorción de P mediante el diseño experimental Plackett-Burman y se optimizaron estas con el diseño de Box-Behnken; a la fibra se le realizó la adsorción de Mg.y posteriormente con P a la fibra ya modificada con Mg.

Las variables que influyeron en la adsorción de P mediante el Plackett-Burman son Tamaño de Partícula, Cantidad de Adsorbente y Tiempo, luego de ser optimizados mediante Box-Behnken es 600 µm; 1,23g y 1 hora de contacto respectivamente, con un porcentaje de adsorcion de 13%; mientras que el Mg tubo adsorcion de 54,8% y luego una adsorción de fósforo de 8%

La optimización de los parámetros dio una adsorción baja para el P con respecto al Mg, esto podría ser por la superficie de la fibra, ya que por sus grupos funcionales presentes en esta tiende a tener una carga negativa es por ello la gran afinidad o alto porcentaje de adsorcion del Mg

Los residuos agroindutriales son un material muy prometedor para la adsorción de estos nutrientes y su posible uso como enmienda de suelos, y así suplir la carencia de nutrientes presente en los suelos agrícolas.

Referencias

Cedeño Zambrano, J. R., García Párraga, J. V., Solórzano Cobeña, C. M., Jiménez-Flores, L. A. J., Ulloa Cortazar, S. M., López-Mejía, F. X., Avellán Vásquez, L. E., Bracho Bravo, B. Y., & Sánchez Urdaneta, A. B. (2021). Fertilización Fertilización con magnesio en plátano 'Barraganete' (Musa AAB) Ecuador. *La Granja*, *35*(1), 8–19. https://doi.org/10.17163/lgr.n35.2022.01

Yaashikaa, P. R., Senthil Kumar, P., & Varjani, S. (2022). Valorization of agro-industrial wastes for biorefinery process and circular bioeconomy: A critical review. *Bioresource Technology*, *343*(October 2021), 126126. https://doi.org/10.1016/j.biortech.2021.126126

Percepción de los estudiantes universitarios de los efectos del cambio climático en la seguridad alimentaria 2023

Perception of university students of the effects of climate change on food security 2023

Jurado, E.[1], Otoya, H.R.[2], Espinoza M.B.[3]
[1, 2, 3] Grupo de Investigación Sostenibilidad Socioambiental, Universidad Nacional Federico Villarreal, Lima, Perú

eulaliajurado@gmail.com

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola.

Palabras clave: Seguridad alimentaria, disponibilidad, accesibilidad, crisis alimentaria, cambio climático.

La inseguridad alimentaria y la desnutrición están entre los problemas más graves y comunes que originan los fenómenos meteorológicos, eventos que registran una tendencia creciente en el Perú, Feliciano et al, (2022). señalan que el cambio climático generará riesgos emergentes para la seguridad alimentaria, Existe indiferencia de los habitantes frente a este problema, hay ausencia de programas que preparen como conseguir, proteger los alimentos de los patógenos que puedan contaminarlos, ante esta realidad el objetivo fue analizar la percepción de los estudiantes respecto

a los efectos del cambio climático en la seguridad alimentaria, en una universidad pública y privada de Lima Metropolitana al 2023.
Se aplico una encuesta, a una muestra de 308 alumnos, se realizaron talleres de sensibilización.
La población sigue creciendo, producción agrícola se estanca y las tierras para cultivo se reducen, la tasa de pobreza está creciendo, el ingreso real per cápita afecta la accesibilidad de alimento. La percepción de los estudiantes respecto al cambio climático está influenciada por la calidad de la educación que reciben. El 41% cree que no tienen el conocimiento suficiente, el 70% sostienen que en su casa hay una tendencia a adquirir cada vez menos cantidad de alimentos debido a su poca oferta en los mercados y el 74% piensan que es porque los ingresos familiares son cada vez menores.
El riesgo a sufrir hambre está aumentando en el Perú, la producción de alimentos cubre la demanda, pero el problema está en la accesibilidad dado que el ingreso nominal, se mantiene constante y con tasa de inflación creciente., coincidiendo con Esquinas et al (2006) que afirma, que en América Latina se produce suficientes alimentos para dar de comer a toda la humanidad.
Existe disponibilidad de alimentos suficiente de alimentos, el 57% de la muestra considera que cubre la demanda, el problema es la pobreza que limita el acceso a la alimentación y para resolverlo es necesaria la voluntad política.
La educación sobre el cambio climático proporciona conocimientos, también empodera a los estudiantes para que sean ciudadanos informados y activos para contribuir a la construcción de un futuro más sostenible.

Referencias

Esquinas, J.L., Vivero M. Á., López Ma., Porras C. (2006) Seguridad Alimentaria y Políticas de Lucha contra el Hambre. http://www.oda-alc.org/documentos/1349637802.pdf
Feliciano, R. J., Guzmán-Luna, P., Boué, G., Mauricio-Iglesias, M., Hospido, A., & Membré, J. (2022). Strategies to mitigate food safety risk while minimizing environmental impacts in the era of climate change. Trends in Food Science and Technology, 126, 180-191. doi:10.1016/j.tifs.2022.02.027

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Estudio De La Cinética De Liberación De Fertilizantes A Partir De Micropartículas De Biocarbón Impregnadas Con Fertilizantes Y Encapsuladas En Perlas De Alginato De Calcio

Study Of The Release Kinetics Of Fertilizers From Biochar Micro Particles Impregnated With Fertilizers And Encapsulated In Calcium Alginate Beads

Avalos, M.[1], Ale, N.[2], Muñoz, P.[3], Tapia, N.[4], De Lama, G.[5], Bravo, M.[6]

[1,2,3,4,5,6] Grupo de investigación de obtención de geles a partir de biopolímeros y aplicaciones-GELPOL, Facultad de Química e Ing. Química - Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima, Perú.

pmunozh@unmsm.edu.pe

Área temática: Química ambiental y Agrícola.

Palabras clave: Biocarbón, Encapsulación, alginato, nitrógeno.

El objetivo de la presente investigación fue obtener fertilizantes de liberación controlada (FLC), mediante el uso de micropartículas de biocarbón (biochar) impregnadas con fertilizantes y encapsuladas en perlas de alginato de calcio con la finalidad de contribuir a una agricultura de precisión. El biocarbón es un material poroso obtenido como resultado de la descomposición termoquímica de diversos residuos agrícolas a temperaturas de 400 a 700 °C en ausencia de oxígeno, conocido como proceso de pirolisis.

Las micropartículas se obtuvieron a través de la trituración del biocarbón, obtenido del árbol de algarrobo, en un molino de cuchillas de acero seguido de un tamizado. Luego se introdujeron en una solución acuosa 0,3 M del fertilizante NH_4NO_3 para atrapar sus iones. Estas partículas se filtraron, lavaron y secaron en una mufla a 100 °C durante 30 min. Enseguida se mezclaron con una solución de alginato de sodio al 1,6 % y con ayuda de una bomba peristáltica se hizo gotear sobre una solución 0,2 M de $CaCl_2$, obteniéndose perlas esféricas. Para seguir la cinética de liberación de los iones del fertilizante se usó 10 g de perlas en un vaso con 500 mL de agua desionizada en agitación constante a los pHs 7 y 5, la variación de la concentración en la solución acuosa se midió utilizando el método conductimétrico.

La liberación máxima del fertilizante para el pH=7 se alcanza a los 120 min y para pH=5 a 80 min. Del tratamiento de los datos experimentales con la ecuación lineal de Korsmeyer–Peppas los valores de la constante n para pH 7 y 5 son 0,4581 y 0,4353 respectivamente, estos resultados demuestran que la liberación del fertilizante se debe principalmente al proceso de difusión de los iones del fertilizante a partir de la parte interna de las perlas.

Referencias

Salama, D. M.; Abd El-Aziz, M. E.; El-Naggar, M. E.; Shaaban, E. A.; Abd El-Wahed, M. S. (2021). Synthesis of an eco-friendly nanocomposite fertilizer for common bean based on carbon nanoparticles from agricultural waste biochar. Pedosphere, 31(6), 923–933.

Sim, D. H. H.; Tan, I. A. W.; Lim, L. L. P.; Hameed, B. H. (2021). Encapsulated biochar-based sustained release fertilizer for precision agriculture: A review. Journal of Cleaner Production, 303, 127018.

Los autores agradecen al Vicerrectorado de Investigación y Posgrado de la UNMSM por el soporte financiero al proyecto C23071231, (2023) “Encapsulación de nanopartículas de biocarbón impregnadas con fertilizantes en perlas de biopolímeros y estudio de la cinética de liberación de fertilizantes

Revisión De La Titulación De Boehm En La Determinación De Grupos Funcionales Oxigenados En Biocarbones

Boehm Revisited Titulation Of Oxigenated Funcional Groups Determination In Biochar

Juan Carlos Villegas Hernández [1], Efraím A. Serna-Galvis[1], Javier Silva-Agredo[1]
[1]Grupo de Investigación en Remediación Ambiental y Biocatálisis (GIRAB), Universidad de Antioquia, Medellín, Antioquia.

javier.silva@udea.edu.co

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola.
Palabras clave: **Titulación de Boehm, Grupos Funcionales Oxigenados, Área Superficial, Biocarbones, Espectroscopia Infrarroja.**

Los residuos agroindustriales vienen siendo evaluados dentro de la química sostenible y la economía circular. Desde esta aproximación, las industrias de los materiales, en especial de los biocarbones, están promoviendo su utilización para aplicaciones ambientales (adsorción y catálisis). Sin embargo, técnicas de análisis cada vez más específicas y complejas instrumentalmente son empleadas en la caracterización físico-químicas de los biocarbones; lo cual puede representar una limitación desde un punto de vista práctico. En el presente trabajo tenemos una revisión de la titulación de Boehm como técnica de análisis de bajo costo, para la determinación de grupos funcionales oxigenados en biocarbones.

Para tal propósito, consideramos un biocarbón a partir de aserrín de industria de la madera. La biomasa fue tamizada y clasificada según tamaño de partícula (A > 850µm (0.6%), B 850-250µm (44%), C 250-75µm (39%) y D < 75µm (14%)); la fracción C fue pirolizada con limitación física de entrada de O_2 (500°C por 2h, 8°C/min). El biocarbón obtenido fue lavado (ácido/base) hasta pH neutro (~8.0), y secado. La valoración se realizó mezclando 600mg de biocarbón con 50mL de $NaHCO_3$ 0.01N, Na_2CO_3 0.01N, para los grupos ácido fuerte, respectivamente; y NaOH 0.01N para el total de grupos ácidos, la mezcla se cerró herméticamente y agitó (250 rpm por 48h), se centrifugó (2500 rpm), decantando la suspensión, se tituló por retroceso con HCl 10mN y se cuantificaron los grupos oxigenados de la periferia del biocarbón (aldehídos, cetonas, lactonas, fenoles y ácido carboxílicos). Los resultados dan cuenta del efecto de diferentes variables: concentración, tiempo, preparación de los reactivos, ácidos y bases, tamaño de partícula de los biocarbones, tiempo, temperatura, tipo de agitación, recipiente de reacción, y separación de las fases. Adicionalmente, para el biocarbón analizado, las proporciones de grupos oxigenados fueron: Fenoles (0.033±0.002 mmol/g), lactonas y ácidos carboxílicos (0.010±0.002 mmol/g).

Referencias

Ackremann, J., Krueger. A., Highly sensitive and reproducible quantification of oxygenated surface groups on carbon nanomaterials. Carbon, 163 (2020) 56-62.

Schönherr, J., Buchheim, J. R., Scholz, P., Adelhelm P.,M.C.Boehm titration revisited (part I): practical aspects for achieving a high precision in quantifying oxygen-containing surface groups on carbon materials. j., Carbon Research, 4 (2018) 21.

Agradecimientos: Al Proyecto CODI-UdeA, Código 2022-53586

Evaluación De La Capacidad Bioestimulante De Microalgas Nativas De Las Regiones De Barú Y Alanje, Provincia De Chiriquí

Evaluation Of Biostimulant Capacity From Native Microalgae Of The Barú And Alanje Regions, Chiriquí Province

Andrea Polo[123], Miguel J. Vega-Quiel, Byron Álvarez[123,], Ariadna Batista[123], Cintia Gómez-Serrano[4], Francisco Acién[4].

[1]Escuela de Química, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad Autónoma de Chiriquí, David, Panamá.

[2]Maestría en Ciencias Químicas con Énfasis en Inocuidad Alimentaria, Facultad de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad Autónoma de Chiriquí, David, Panamá

[3]Centro de Investigación de Productos Naturales y Biotecnología, Universidad Autónoma de Chiriquí, David, Chiriquí, Panamá.

[4]Grupo de Investigación Bio173- Biotecnología De Microalgas Marinas, Universidad de Almería, Almería, España.

Andrea.polo@unachi.ac.pa

Área temática: Química Ambiental y Agrícola.

Palabras claves: Bioestimulantes, biotecnología, extractos, fitohormonas, microalgas.

El desarrollo de bioestimulantes producidos a partir de microalgas es una tecnología prometedora para aportar una mayor sostenibilidad al desarrollo agrícola. Estos bioproductos pueden actuar de diferentes formas para el crecimiento y desarrollo de los cultivos, mejorando las características del suelo, la actividad enzimática y microbiológica. Las investigaciones sobre el uso de bioestimulantes a base de microalgas son escasas en Panamá, por ello su aplicación posee un alto potencial para el desarrollo del país.

En este estudio se evaluaron los efectos de distintas concentraciones de extractos fitohormonales de microalgas de Barú y Alanje, en Chiriquí-Panamá en bioensayos con berro, trigo, soja, y pepino. Los efectos bioestimulantes fueron evaluados a distintas concentraciones de extractos de microalgas con código **Al_2, Bar_1 y Bar_4, y SA a** 0.1g/L y 0.5 g/L cada una; siendo **Bar_4 (0.1 g/L)** la que presentó mejor efecto bioestimulante en el ensayo de índice de germinación con semillas de berro, obteniendo un número de germinación de 10 ± 3.21 y un efecto bioestimulante de 319 ± 0.38 % con respecto al control. **Bar_1 (2 g/L)** presentó el mejor efecto en el ensayo de retención de clorofilas en trigo por efecto de las citoquininas obteniendo una relación ABS/Peso de 9.1769 ± 0.44 y efecto bioestimulante de 324 ± 2.26%. **Al_2 (2 g/L)** presentó el mejor efecto en el ensayo de soja para el desarrollo de raíces adventicias por el efecto de las auxinas, obteniendo un numero de raíces de 35 ± 16.00 y un efecto bioestimulante de 331 ± 1.4%. Por último, **Al_2 (2 g/L)** presentó el mejor efecto sobre el engrosamiento de cotiledones en semillas de pepino por efecto de las citoquininas, obteniendo una variación entre pesos de 0.15827 ± 0.0356 g y un efecto bioestimulante 248 ± 0.59%.

La consideración de las fitohormonas presentes en las microalgas como un factor clave en la valorización de estos organismos microscópicos abre perspectivas prometedoras; no solo se trata de una oportunidad creciente, sino también de un enfoque innovador que podría contribuir significativamente a mejorar la eficiencia y la sostenibilidad en la agricultura.

Referencias

Drobek, M., Frąc, M., & Cybulska, J. (2019). Plant Biostimulants: Importance of the Quality and Yield of Horticultural Crops and the Improvement of Plant Tolerance to Abiotic Stress—A Review. Agronomy, 9(6), 335. https://doi.org/10.3390/agronomy9060335

Ohri, P., Bhardwaj, R., Bali, S., Kaur, R., Jasrotia, S., Khajuria, A., & Parihar, R. (2015). The Common Molecular Players in Plant Hormone Crosstalk and Signaling. Current Protein & Peptide Science, 16(5), 369–388. https://doi.org/10.2174/1389203716666150330141922

Actividad Antioxidante Y Contenido De Compuestos Polifenólicos En Diferentes Variedades De Caña (*Saccharum officinarum* L.), Cultivadas En La Amazonia Colombiana

Antioxidant Activity And Polyphenolic Compound Content In Different Varieties Of Sugarcane (*Saccharum officinarum* L.) Cultivated In The Colombian Amazon

Florez Calderón B.; Acosta Vega L; Cuéllar Álvarez, L.* [1]

[1]Grupo de Investigación en Productos Naturales Amazónicos-GIPRONAZ, Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Universidad de la Amazonia, Florencia, Caquetá, Colombia.

li.cuellar@udla.edu.co

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola.

Palabras clave: Caña, Actividad antioxidante, Polifenoles totales, Amazonia.

El cultivo de caña (*Saccharum officinarum* L.) es de gran importancia socioeconómica en el departamento del Caquetá, territorio que integra la Amazonia Colombiana. Lo anterior debido a que, es uno de los cultivos que contribuye en gran medida a la economía del departamento. Sin embargo, existe bajos reportes de investigación alrededor de la actividad antioxidante de las variedades adaptadas a las condiciones climáticas y edafológicas de la Amazonia Colombiana, zona con una humedad relativa mayor al 85% y pH del suelo ácido, así como alto contenido de Aluminio. El objetivo de esta investigación consistió en evaluar la composición fenólica total y actividad antioxidante de las variedades de caña de azúcar (*Saccharum officinarum* L.), cultivadas en el Centro de Investigaciones Amazónicas, CIMAZ – Macagual, para lo cual se recolectaron muestras de "guarapo" o jugo de caña, de las variedades CC-01-1940, CC-93-7711, CC-97-7170 y CC-93-4181. Seguidamente, se determinó el contenido en polifenoles totales haciendo uso del método de Folin-Ciocalteu, y la actividad antioxidante mediante los métodos de FRAP, ABTS y DPPH, finalmente se realizó un análisis estadístico con el fin de establecer si existía diferencia estadísticamente significativa en la actividad antioxidante y el contenido de polifenoles entre las variedades estudiadas. Los resultados permitieron determinar que tanto la variedad como el tiempo de cosecha (seca y lluvia), afecta el contenido de polifenoles y la actividad antioxidante, y que la variedad que presentó mayor contenido en compuestos bioactivos fue la variedad CC-93-7711 y la temporada que mejores resultados presento fue la temporada seca, la cual reportó un contenido de fenoles totales (80,5 ± 0,9 mg AG / g de muestra); FRAP (86,4 ± 4,3 mg AA/ g de muestra); ABTS (211,4 ± 3,9 mg Trolox / g de muestra); DPPH (0,6 ± 0,03 mg Trolox / g de muestra). Según reportes de AGROSAVIA, la variedad CC-93-7711 está adaptada para condiciones de montaña (diferentes a las condiciones tropicales de la Amazonia Colombiana), la cual alcanza rendimientos mayores a 120 toneladas de caña por hectárea y más de 14 toneladas de panela por hectárea. En este estudio, se evidenció que la variedad de la especie *Saccharum officinarum* L. CC-93-7711, mostró mayor contenido de metabolitos secundarios y actividad antioxidante, pese a que dicha variedad se cultiva principalmente en otras zonas de condiciones de suelo y clima diferentes de Colombia.

Referencias

Abbas, S. R., Sabir, S. M., Ahmad, S. D., Boligon, A. A., & Athayde, M. L. (2014). Phenolic profile, antioxidant potential and DNA damage protecting activity of sugarcane (Saccharum officinarum). Food Chemistry, 147, 10–16. https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2013.09.113

Agronet, M. (2018). Participación Departamental en la Producción y en el Área Cosechada. https://www.agronet.gov.co/estadistica/Paginas/home.aspx?cod=2

Formas De Eliminación De Medicamentos No Consumidos Y/O Vencidos En Hogares Del Distrito De Chorrillos, Lima-Perú

Ways To Dispose Of Unconsumed And/Or Expired Medications In Homes In The District Of Chorrillos, Lima-Perú

Gonzales, B.[1], Parreño, J.[1], Pérez, E.[1]
[1]Universidad Norbert Wiener. Facultad de Farmacia y Bioquímica.

jparrenot@unmsm.edu.pe

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola.
Palabras clave: medicamentos vencidos, eliminación de medicamentos.

Introducción, actualmente en el Perú no hay un adecuado manejo en la eliminación de medicamentos vencidos o no consumidos en los hogares, en consecuencia, existe una gran preocupación sobre las prácticas de eliminación de medicamentos adoptadas por las personas en sus hogares ya que puede generar un daño potencial en el medio ambiente, en la salud de las personas además del riesgo de ser incorporados al mercado informal. frente a este problema de salud pública se decide realizar el presente estudio. Materiales, el enfoque para esta investigación es cuantitativo y descriptivo, este tipo de estudios cuantitativos usan instrumentos estandarizados, datos numéricos, análisis estadísticos y se intenta generalizar los resultados encontrados en un grupo a una de mayor colectividad, Metodología, de investigación es no experimental de corte transversal, para esto se realizó encuestas en 291 hogares del distrito de Chorrillos. Resultados, se obtuvo que las dos principales causas de eliminación de medicamentos son por la fecha de vencimiento y el hecho de no ser consumidos representando en conjunto el 87,7%, el lugar elegido para su eliminación es el tacho de basura con un 89,7%, en cuanto a las prácticas de eliminación solo el 17,8% elimina de forma adecuada los medicamentos líquidos, y el 18,2% desecha de forma adecuada sus medicamentos sólidos. Discusión, efectivamente se puede evidenciar que la población desconoce sobre el tratamiento previo que se les da a los medicamentos antes de ser desechados, esto básicamente se debe a la deficiente información que existe en nuestro medio con respecto a estos temas importantes de salud pública. Conclusión, se determinó que gran parte de la población desconoce el manejo adecuado y disposición final de medicamentos no consumidos y vencidos, esto puede afectar negativamente en el medio ambiente y salud de las personas del distrito de Chorrillos.

Referencias

Bartolomé, M. (2020). Recolección en la farmacia de medicamentos sin uso o vencidos: Una solución a la disposición de medicamentos en el hogar. *TEKHNË*. 32(2). 32-41.

Menéndez, E., Morillo, S. (2023). *Determinación de la disposición final de residuos de medicamentos de los habitantes del distrito de Chiguata, Arequipa* (Tesis para optar el título de Químico Farmacéutico, Universidad María Auxiliadora). Repositorio Digital UMA. https://repositorio.uma.edu.pe/bitstream/handle/20.500.12970/1432/TESIS%20MENENDEZ-MORILLO.pdf?sequence=1&isAllowed=y.

Síntesis De Biocatalizadores Heterogéneos De Peroxidasa De *Panicum Maximum* Inmovilizada En Carbón Activado Para La Degradación De Ìndigo Carmín

Synthesis Of Heterogeneous Biocatalysts Of *Panicum Maximum* Peroxidase Immobilized On Activated Carbon For Indigo Carmine Degradation

Vargas, D. [1], **Barbosa, O**[1].

[1]Grupo de Investigación en Materiales Porosos con Aplicaciones Ambientales (GIMPOAT), Universidad del Tolima, Ibagué, Colombia.

dpvargasd@ut.edu.co

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola.

Palabras clave: Biocatalizadores, carbón activado, inmovilización, degradación, índigo carmín.

La contaminación hídrica por el vertimiento de colorantes sintéticos es una problemática ambiental de gran relevancia. Entre la variedad de tintes, el índigo carmín (IC) es uno de los más utilizados, particularmente en la industria textil, generándose toneladas de este residuo al año, el cual genera gran preocupación, no sólo por el aspecto visual que produce, sino por su impacto en los ecosistemas y la salud humana, razón por la cual su remoción de fuentes hídricas es un tema de interés investigativo. El uso de enzimas oxidorreductasas es una opción viable para la biorremediación de afluentes hídricos contaminados con colorantes, sin embargo, su uso directo en procesos de descontaminación resulta complejo dadas las condiciones de operación, las cuales afectan la estabilidad de las enzimas. Esta limitación, puede ser superada a través de estrategias de ingeniería de proteínas, que incluye la inmovilización en soportes, tales como los carbones activados, aprovechando las propiedades texturales y químicas de estos materiales. Conforme con lo mencionado, en este trabajo se prepararon carbones activados granulares empleando como precursores: semilla de mango (CAGSM) y semilla de aguacate (CAGSA), mediante activación química con $CaCl_2$, dichos materiales junto con un carbón comercial (CAG), fueron empleados en la inmovilización de peroxidasa de pasto guinea (*Panicum máximum (PPM)*), generando los biocatalizadores que fueron probados en la degradación de (IC).

Los materiales se caracterizaron textural y químicamente, obteniendo áreas superficiales entre 430-726 m^2g^{-1}, con volúmenes de poro entre 0.20-0.29 cm^3g^{-1} y una química superficial conformada principalmente por grupos carboxílicos y fenólicos. Posteriormente se llevó a cabo la inmovilización de la enzima sobre los carbones, evaluando: tiempo de contacto, carga enzimática, pH y temperatura. Los parámetros ideales para promover el máximo porcentaje de inmovilización enzimática correspondieron a: enzima-soporte 0.3:50 mg, tiempo de 2h y temperatura de 30°C. El pH correspondió a 5 y 3 para CAGSM y CAGSA, respectivamente. Estos biocatalizadores lograron degradar 85.34% y 78.25 de IC empleando CAGSM-*PPM* y CAGSA-*PPM* después de 2 horas de reacción, respectivamente. En conclusión, los materiales carbonosos preparados presentaron características adecuadas para inmovilizar *PPM*, así mismo, los biocatalizadores obtenidos muestran potencial para degradar IC.

Referencias

Chowdhury, M. F. Khandaker, S., Sarker, F., Islam, A., Rahman, M. T., y Awual, M. R. (2020). Current treatment technologies and mechanisms for removal of indigo carmine dyes from wastewater: A reviewJournal of Molecular Liquids, 318,114061, https://doi: 10.1016/j.molliq.2020.114061.

Vargas, D.P., Giraldo, L. y Moreno-Piraján, J.C. (2016). Characterisation of granular activated carbon prepared by activation with $CaCl_2$ by means of gas adsorption and immersion calorimetry. Adsorption 22, 717–723. https://doi.org/10.1007/s10450-016-9764-2.

Evaluación De Los Niveles De NO_2 y SO_2 En Diversas Zonas Con Alto Tráfico En Panamá

Evaluation Of NO_2 And SO_2 Levels In Various High-Traffic Areas In Panama

Espinosa, A[1], Hernández B., C.[2], Garcés, M.[3], , Escobar, E.[1], Olmos, J.[1], Muñoz, M.[4], Jiménez, J.[3], Gallardo, N.[3]

[1]Centro Experimental de Ingeniería, Universidad Tecnológica de Panamá, Panamá, Panamá
[2]Facultad de Ciencias y Tecnología, Universidad Tecnológica de Panamá, Panamá, Panamá.
[2]Facultad de Ciencias Naturales, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.
[4]Facultad de Ingeniería Civil, Universidad Tecnológica de Panamá, Panamá, Panamá.

alma.espinosa@utp.ac.pa

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola.

Palabras clave: NO_2, SO_2, AEROQUAL SERIE 500, alto tráfico, USEPA.

Los constantes incendios no controlados de los vertederos causan la generación de gases tóxicos, que, aunado al alto tráfico, generan contaminantes como el dióxido de nitrógeno (NO_2) y dióxido de azufre (SO_2), que son críticos e impactan a la población, la fauna, flora y edificaciones, en su proximidad. En vista de la falta de equipamiento de alto nivel, que es costoso, se ha promovido por parte de entidades regulatorias nacionales e internacionales, la iniciativa del uso de equipos denominados de bajo costo, para recabar información local, preliminar e inicial de los sitios de interés, pero sobre todo para motivar a la comunidad, a que se interese por la calidad del aire donde vive y realiza sus actividades diarias.

En esta investigación se hace uso del equipo de bajo costo AEROQUAL SERIE 500, el cual cuenta con sensores que permiten el monitoreo de NO_2 y SO_2, en tiempos de medición que suelen estar en el orden de 20 minutos hasta 1 hora, para el monitoreo en diversas zonas de alto tráfico de Panamá. Los resultados obtenidos se cotejaron con los límites establecidos por la USEPA (United States Environmental Protection Agency), y las guías de la OMS, sólo con fines comparativos, pues no existen regulaciones para equipos de bajo costo actualmente.

Luego del monitoreo efectuado, se puede indicar que los mayores niveles de NO_2 se registraron en los siguientes sitios: Parque de Santiago-Veraguas (0.071 ppm), Bugaba-Chiriquí (0.069 ppm) y Parque Terronal-David (0.045 ppm), todos por debajo del límite de 0.100 ppm (1 hora) establecido por la USEPA. Para el SO_2, los niveles más altos se encontraron en: Cruce de la Ricardo J. Alfaro-Transístmica-Panamá (0.185 ppm), Penonomé-Coclé (0.150 ppm), Parque Terronal-David (0.110 ppm), Parque Miguel de Cervantes Saavedra-David (0.095 ppm) y La Gran Estación-San Miguelito (0.090 ppm), todos superando el límite de 0.075 ppm (1 hora) de la USEPA.

Los resultados revelan que, mientras que los niveles de NO_2 en las áreas estudiadas están dentro de los límites aceptables, los niveles de SO_2 superan los límites recomendados por la USEPA, en la mayoría de los sitios, y requiere su atención por parte de las entidades regulatorias nacionales y la sociedad. Se demuestra la importancia del uso de equipamiento de bajo costo para recabar información inicial y local de zonas de interés, como las de alto tráfico.

Referencias

Organización Meteorológica Mundial. (2019). Informe sobre la calidad del aire global. OMM.

United States Environmental Protection Agency, USEPA. (2020). National Ambient Air Quality Standards (NAAQS).

Evaluación De Los Niveles De Ozono Y CO_2 En Diversas Zonas Con Alto Tráfico En Panamá

Evaluation Of Ozone And CO_2 Levels In Various High-Traffic Areas In Panama

Escobar, E.[3], Hernández B., C.[1], Garcés, M.[2], Espinosa, A.[3], Olmos, J.[3], Muñoz, M.[4], Jiménez, J.[2], Gallardo, N.[2]

[1]Facultad de Ciencias y Tecnología, Universidad Tecnológica de Panamá, Panamá, Panamá
[2]Facultad de Ciencias Naturales, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá
[3]Centro Experimental de Ingeniería, Universidad Tecnológica de Panamá, Panamá, Panamá
[4]Facultad de Ingeniería Civil, Universidad Tecnológica de Panamá, Panamá, Panamá

ernesto.escobar@utp.ac.pa

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola.
Palabras clave: O_3, CO_2, AEROQUAL SERIE 500, alto tráfico, USEPA.

La contaminación ambiental en zonas de alto tráfico es un problema creciente en Panamá, en particular por las emisiones atmosféricas derivadas, que afectan a la población, la flora, fauna, e incluso las edificaciones localizadas próximas a estos sitios. En Panamá se dispone de poca información sobre contaminantes críticos, como el ozono (O_3) y el dióxido de carbono (CO_2), y esto incluye la disponibilidad de laboratorios de ensayo, y la existencia de regulaciones técnicas aplicables, lo cual refleja las limitantes en el tema. Actualmente existen iniciativas como las de la USEPA (United States Environmental Protection Agency), en la que se promueve el uso de equipamiento de bajo costo, a fin de concientizar a la población, las autoridades y al menos recabar un mínimo de información, aunque ciertamente no tenga carácter legal, pero sí moral, ante la posibilidad del empoderamiento de la sociedad, en virtud de su participación y su exigencia, de ambientes más seguros para su bienestar.

Para el presente trabajo se ha utilizado el equipo AEROQUAL SERIE 500, que cuenta con sensores que permiten el monitoreo de O_3 y CO_2 atmosférico, que son recomendados por la USEPA, y con el que se realizan mediciones de forma directa en 20 minutos hasta 1 hora. Se seleccionaron diversas zonas de alto tráfico en Panamá y los resultados obtenidos se cotejaron con los límites establecidos por la USEPA y las guías de la OMS, sólo con fines comparativos, pues para equipamiento de bajo costo no existen regulaciones.

Luego del monitoreo, los niveles más altos de O_3 se encontraron en: Parque de Santiago-Veraguas (0.160 ppm), Bugaba-Chiriquí (0.145 ppm), Boquete-Chiriquí (0.141 ppm), Penonomé-Coclé (0.141 ppm) y Tocumen-Panamá (0.117 ppm). La mayoría de los sitios superaron el límite de 0.070 ppm (8 horas) establecido por la USEPA (referencia utilizada sólo con fines comparativos). Los niveles más altos de CO_2 se registraron en: Parque La Bandera-Chitré (503 ppm), Parque de Santiago-Veraguas (500 ppm), 5 de mayo, Panamá (491 ppm), Penonomé, Coclé (489 ppm), Campus UTP, Panamá (483 ppm), Parque Belisario Porras-Panamá (483 ppm), La Gran Estación-San Miguelito (477 ppm) y Parque La Bandera-Chitré (476 ppm). La Organización Meteorológica Mundial reportó en 2019 un promedio mundial de 410 ppm, considerado ya alarmante. Los resultados indican que la mayoría de los sitios evaluados presentan niveles de O_3 y CO_2 por encima de los promedios y límites recomendados, lo que sugiere una exposición considerable a contaminantes dañinos en zonas de alto tráfico.

El uso del AEROQUAL SERIE 500 proporciona una visión inicial valiosa sobre los niveles de contaminación en áreas de alto tráfico en Panamá. Los datos obtenidos muestran la urgente necesidad de intervenciones ambientales y estudios más detallados con equipamiento especializado, para mitigar los riesgos asociados con la contaminación del aire.

Referencias

Organización Meteorológica Mundial. (2019). Informe sobre la calidad del aire global. OMM.
United States Environmental Protection Agency (USEPA). (2020). National Ambient Air Quality Standards (NAAQS).

Evaluación De Los Niveles De PM_{10} y $PM_{2.5}$ En Diversas Zonas Con Alto Tráfico En Panamá

Evaluation Of PM_{10} And $PM_{2.5}$ Levels In Various High-Traffic Areas In Panama

Olmos, J.[3], Garcés, M.[1], Hernández B., C.[2], Espinosa, A.[3], Escobar, E.[3], Muñoz, M.[4], Jiménez, J.[1], Gallardo, N.[1]

[1]Facultad de Ciencias Naturales, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá
[2]Facultad de Ciencias y Tecnología, Universidad Tecnológica de Panamá, Panamá, Panamá
[3]Centro Experimental de Ingeniería, Universidad Tecnológica de Panamá, Panamá, Panamá
[4]Facultad de Ingeniería Civil, Universidad Tecnológica de Panamá, Panamá, Panamá

Jorge.olmos@utp.ac.pa

Área Temática: Química Ambiental y Agrícola,
Palabras clave: PM_{10}, $PM_{2.5}$, AEROQUAL SERIE 500, tráfico, USEPA.

En este trabajo se presentan los resultados de mediciones de PM_{10} y $PM_{2.5}$ efectuadas en diversas áreas donde existe alto tráfico en Panamá, utilizando equipamiento de bajo costo, en particular el AEROQUAL SERIE 500. Los datos preliminares obtenidos servirán como base para estudios futuros con equipos más especializados, y se enmarcan a los objetivos e iniciativas de sensibilización por parte de las entidades nacionales regulatorias, para mejorar la calidad del aire del país.

El AEROQUAL SERIE 500 cuenta con sensor que permite el monitoreo simultáneo de PM_{10} y $PM_{2.5}$, con tiempos de medición en el orden de 20 minutos hasta 1 hora. Las mediciones se realizaron en diversas zonas donde hay alto tráfico en Panamá. Los resultados obtenidos se cotejaron con los límites establecidos por la USEPA (United States Environmental Protection Agency) sólo con fines comparativos, pues no existen regulaciones para este tipo de metodologías.

En cuanto a los resultados, se puede indicar que los niveles más altos de PM_{10} se observaron en la Gran Estación de San Miguelito y en Penonomé-Coclé, ambos con 34 µg/m³, seguidos por Parque Belisario Porras-Chitré y 5 de mayo-Panamá, ambos con 31 µg/m³, y Tocumen-Panamá con 30 µg/m³. Todos estos valores están por debajo del límite de 150 µg/m³ establecido por la USEPA para un período de 24 horas. En cuanto a $PM_{2.5}$, los niveles más altos se registraron en Tocumen-Panamá, con 10 µg/m³, seguido de 5 de mayo-Panamá y Penonomé-Coclé, ambos con 9 µg/m³, y la Gran Estación de San Miguelito y Parque Belisario Porras-Chitré, ambos con 8 µg/m³. Estos valores también están por debajo del límite de 35 µg/m³ de la USEPA.

Los resultados indican que, aunque los niveles de PM_{10} y $PM_{2.5}$ están por debajo de los límites establecidos por la USEPA, su presencia sugiere una posible preocupación potencial, para la salud pública, especialmente en zonas de alto tráfico.

Se demuestra la viabilidad del uso del AEROQUAL SERIE 500 para la evaluación preliminar de la calidad del aire. Los resultados obtenidos resaltan la necesidad de estudios más detallados, con equipamiento más especializados, y la implementación de políticas de control de la contaminación atmosférica.

Referencias

Kumar, P., & Morawska, L. (2019). Critical review of low-cost sensing technologies for comprehensive management of urban air quality. Atmospheric Environment, 219, 117020. doi:10.1016/j.atmosenv.2019.117020

Snyder, E. G., et al. (2013). The changing paradigm of air pollution monitoring. Environmental Science & Technology, 47(20), 11369-11377. doi:10.1021/es4022602

United States Environmental Protection Agency (USEPA). (2020). National Ambient Air Quality Standards (NAAQS).

Estudio De La Interacción De Fengicinas Producidas Por *Bacillus velezensis* MEP$_2$18 Con Modelos De Membrana Representativos De *Pseudomonas Aeruginosa*

Study Of The Interaction Of Fengycins From *Bacillus velezensis* MEP$_2$18 With Model Representative Membranes Of *Pseudomonas Aeruginosa*

Ortega, J. D.[1]; Medeot, D.[2]; Jofré, E.[2], Manrique-Moreno, M.[1]

[1]Grupo de Bioquímica Estructural de Macromoléculas, Universidad de Antioquia, Medellín, Antioquia.

[2]Laboratorio de Biología Molecular de las Interacciones Planta-Bacteria, INBIAS-CONICET-Universidad Nacional de Río Cuarto, Ruta Nacional 36 Km 601, Córdoba, Argentina.

marcela.manrique@udea.edu.co

Área Temática: Bioquímica.

Palabras clave: **Fengicinas, Modelos de Membrana, Estudios Biofísicos, Espectroscopia Infrarroja.**

Las Fengicinas C16-C17 son lipopéptidos cíclicos producidos por *Bacillus velezensis* MEP218 en condiciones de cultivo optimizadas, que han demostrado tener actividad antimicrobiana contra bacterias fitopatógenas de relevancia en cultivos agrícolas, así como contra patógenos humanos multirresistentes a antibióticos. Sin embargo, el mecanismo por el cual las Fengicinas ejercen su actividad antimicrobiana no ha sido totalmente dilucidado. En el presente estudio, se evaluó la interacción de estas Fengicinas específicas producidas por MEP$_2$18 con modelos representativos de membranas de *Pseudomonas aeruginosa*, estos modelos permiten evaluar la afinidad del lipopéptido cíclico por los lípidos de la membrana para tratar de identificar interacciones responsables de su actividad biológica. Las Fengicinas C16-C17 fueron obtenidas mediante precipitación ácida del sobrenadante de cultivos de MEP$_2$18 en medio MMOLP y purificadas por HPLC. Para los experimentos de espectroscopia infrarroja se prepararon bicapas lipídicas soportadas a partir de los lípidos más representativos de membranas de *P. aeruginosa* (POPE: DMPG:CL, 65:23:12 w/w) y también de extractos de lípidos totales de *P. aeruginosa* PA01 obtenidos por la metodología de Bligh & Dyer. A partir de soluciones stocks de los lípidos disueltos en cloroformo, se depositaron 20µl del stock para posterior evaporación del solvente, los modelos se hidrataron con buffer (10 mM HEPES, 500 mM NaCl, 1 mM EDTA, pH=7.4) por encima de la temperatura de transición de fase de los lípidos. Los resultados evidenciaron que la Fengicina C16-C17 tiene la capacidad de inducir cambios en el comportamiento termotrópico de los modelos lipídicos. El análisis de los resultados demuestra que el mecanismo de acción del péptido podría estar relacionado con una interacción no selectiva con los lípidos de membrana de *P. aeruginosa*.

Referencias

D.B. Medeot, M. Bertorello-Cuenca, J.P. Liaudat, F. Alvarez, M.L. Flores-Cáceres, E.J.B.c. Jofré, Improvement of biomass and cyclic lipopeptides production in Bacillus amyloliquefaciens MEP218 by modifying carbon and nitrogen sources and ratios of the culture media, 115 (2017) 119-128.

E.G. Bligh, W.J. Dyer, A rapid method of total lipid extraction and purification, Can J Biochem Physiol, 37 (1959) 911-917.

Agradecimientos: Proyecto CODI 2024-66871.

Evaluación Del Efecto De Los Péptidos Crotalicidina YNA-CATH-ATRA1-ATRA1 En Modelos De Células De Cáncer Mediante Espectroscopia Infrarroja

Evaluation Of the effect Of Crotalicidin And NA-CATH-ATRA1-ATRA1 In Models Of Cancer Cells By Infrared Spectroscopy

Giraldo-Lorza,J.M.[1],Gallego-Londoño,V.[1],Manrique-Moreno,M.[1*]

[1]Grupo de Bioquímica Estructural de Macromoléculas, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia.

juan.giraldo77@udea.edu.co

Área Temática: Bioquímica.
Palabras claves: Espectroscopia infrarroja, células cancerígenas, bicapa lipídica, péptidos bioactivos, interacción lípido-péptido.

En la búsqueda de nuevas alternativas terapéuticas contra el cáncer de seno han surgido moléculas activas en membrana denominadas péptidos bioactivos. El objetivo de este trabajo fue evaluar el efecto de los péptidos Crotalicidina, NA-CATH-ATRA1-ATRA1 y LTX-315, en el comportamiento termotrópico de modelos representativos de células de cáncer por espectroscopia infrarroja. Los modelos fueron construidos a partir de extractos lipídicos obtenidos de las líneas celulares de cáncer de seno MDA-MB-231 y MCF-7, así como de queratinocitos humanos HaCaT. Adicionalmente, se evaluó la interacción de los péptidos con los lípidos principales de la membrana. La evaluación se realizó utilizando un espectrómetro Tensor II de Bruker usando las celdas BioATR II y AquaSpec. Se analizó el efecto del péptido en la transición de fase lipídica de cada sistema mediante el cambio de la posición del número de onda máximo asociado a la extensión simétrica del metileno (vsCH2) del núcleo hidrofóbico, un marcador sensible del empaquetamiento de lípidos en una membrana. Asimismo, se determinó el cambio conformacional del péptido en los ambientes lipídicos de interés con el método BPROT1, un algoritmo multivariante de mínimos cuadrados parciales (PLS) basado en los datos de calibración de 43 proteínas diferentes. Los resultados mostraron que los péptidos inducen cambios en la fluidez entre las células MCF-7 y las MDA-MB-231. Se observó un efecto dependiente de la concentración y al sistema evaluado, donde el péptido con mayor actividad frente a células tumorales fue NA-CATH-ATRA1-ATRA1. Además, se destaca que no es posible relacionar la estructura secundaria de los péptidos con la actividad presentada sobre los modelos de membrana. Este estudio sugiere que los cambios en el perfil lipídico de las células presentan consecuencias notables en la interacción con el péptido, lo cual modula su unión y actividad.

Referencias

Gostaviceanu, A., Gavrilas, S., Copolovici, L., & Copolovici, D. M. (2023). Membrane-Active Peptides and Their Potential Biomedical Application. *Pharmaceutics*, *15*(8).

Stillwell, W. (2016). *An Introduction to Biological Membranes - Composition, Structure and Function* (2 ed.). Elsevier Science.

Agradecimientos: Proyecto CODI 2024-66871.

La Fracción Enriquecida ZC1 De Un Extracto De *Zanthoxylum sp* Produce Cambios Cognitivos Y Moleculares En Animales 3xTg-AD

The ZC1-Enriched Fraction Of A Zanthoxylum sp Extract Produces Cognitive And Molecular Changes In 3xTg-AD Animals

Vargas, P.[1], Muñoz J.[1], Sandoval, A.[1]

[1]Grupo de investigación en Muerte Celular, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

pavargaspi@unal.edu.co

Área Temática: Bioquímica.

Palabras clave: Enfermedad de Alzheimer, Fracción ZC1, amiloide-β (Aβ), Tau hiperfosforilado, LXR.

La enfermedad de Alzheimer (EA) es la demencia más común en el mundo, un trastorno neurodegenerativo de etiología desconocida caracterizado por la acumulación cerebral de placas amiloides y ovillos neurofibrilares conformados por péptidos amiloide-β (Aβ) y la proteína Tau hiperfosforilada. Se ha evidenciado que la activación farmacológica de los receptores nucleares X hepáticos (LXR) producen mejoría cognitiva en modelos murinos de EA, asociado a la regulación transcripcional de múltiples genes (Sandoval-Hernández et al., 2015). Por otra parte, los productos naturales han sido históricamente la mayor fuente de principios activos, en trabajos previos se realizando la búsqueda de extractos vegetales agonistas de LXR, encontrando el género *Zanthoxylum* con actividad terapéutica promisoria in vivo e in vitro para la EA y encontrando las moléculas responsables de la actividad.

Es por ello, que el objetivo de este trabajo es caracterizar el potencial terapéutico de la fracción enriquecida ZC1 como agente terapéutico para la EA. Se recolecto la planta en la Orinoquia, se realizó la extracción y el fraccionamiento del extracto obteniendo aproximadamente 2 gramos de la fracción enriquecida, la cual se caracterizó por HPLC-DAD, se realizó administración por gavage de 50 mg/kg/día a ratones triple-transgénicos de EA (3xTg-AD) y sus respectivos controles con el vehículo, durante 70 días. Se realizó la evaluación comportamental con el laberinto acuático de Morris, se realizó análisis histológicos y moleculares.

Se observó en la prueba de aprendizaje que los animales 3xTg- AD tratados con ZC1 respecto a los 3xTg-AD no tratados presentan reducción en los tiempos de latencia de llegada a la plataforma a lo largo de los días y en la prueba de retención mayor permanencia en las cercanías a la plataforma con diferencias estadísticamente significativas. En cuanto a los cambios histológicos se evidencia la reducción de inmunoreactividad para Iba-1, GFAP, Aβ y p-Tau en los animales 3xTg-AD tratados con ZC1 respecto a los 3xTg-AD no tratados, evidenciando disminución en procesos de inflamación, agregación de placas e hiperfosforilación de Tau. En conjunto estos resultados nos permiten concluir que la fracción enriquecida presenta actividad terapéutica promisoria, los mecanismos moleculares están siendo estudiados en la actualidad.

Extractos De Plantas Con Potencial aActividad Agonista LXR Como Una Estrategia Terapéutica Contra La Enfermedad De Alzheimer

Plant Extracts With Potential LXR Agonist Activity As A Therapeutic Strategy Against Alzheimer's Disease (AD)

Jonathan Muñoz Cabrera [1]; Ana Milena Pérez Silva [1]; Angie Bustos Rangel [1]; Gloria Cardona [2]; Adrián Sandoval Hernández [1]; Gonzalo Arboleda [1]

[1.] Grupo de Muerte Celular y Neurociencias, Instituto de Genética, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

[2.] Grupo de Neurociencias de Antioquía, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia.

jmmunozc@unal.edu.co

Área Temática: Bioquímica.

Palabras Clave: **Extractos vegetales, Enfermedad de Alzheimer, modelo triple transgénico de enfermedad de Alzheimer, Receptores Nucleares LXR, RNA-seq.**

La acumulación extracelular de Aβ e intracelular de TAU hiperfosforilada y la dishomeostasis del calcio son las principales características histopatológicas de la enfermedad de Alzheimer (EA), que se asocian a neurodegeneración. Nuevas estrategias terapéuticas para la EA se han venido estudiando, incluyendo la activación de receptores nucleares tipo II (LXR), que generan mejoría en el desempeño en el Laberinto Acuático de Morris (LAM), con disminución en marcadores histopatológicos y cambios bioquímicos a nivel de la sinapsis en un modelo murino de EA (3xTgAD).

En este trabajo se evaluó el efecto de dos extractos vegetales con actividad agonista LXR, sobre los cambios celulares, moleculares, transcripcionales y comportamentales en modelos de EA. El pretratamiento con los extractos NR y ZM generaron neuroprotección frente a Aβ en cultivos primarios de neuronas hipocampales. Adicionalmente, la exposición crónica de cultivos hipocampales a Aβ presentan una desregulación en los niveles de calcio intracelular, medido mediante sondas fluorescentes para calcio intracelular; estos cambios fueron prevenidos mediante el pretratamiento con extractos vegetales que poseen actividad agonista LXR. Adicionalmente, en el modelo 3xTgAD se encontró que el tratamiento con ZM disminuye los marcadores histopatológicos de EA en el hipocampo y mejora el desempeño durante la prueba de LAM. Finalmente, análisis de RNA-Seq demostró que los animales tratados con el extracto NR causa una expresión diferencial de transcritos en 3744 genes, muchos relacionados con rutas involucradas en sinapsis glutamatérgicas y en la modulación del calcio intracelular. Los resultados evidencian que la activación de receptores LXR usando biomoléculas activas derivadas de plantas, son una potencial estrategia terapéutica contra la EA.

Referencias

Muñoz-Cabrera, J. M., Sandoval-Hernández, A. G., & Arboleda, G. (2021). Type II nuclear receptors with potential role in Alzheimer disease. *Molecular Aspects of Medicine*, *78*. https://doi.org/10.1016/j.mam.2020.100940

Sandoval-Hernández, A. G., Buitrago, L., Moreno, H., Cardona-Gómez, G. P., & Arboleda, G. (2015). Role of Liver X receptor in AD pathophysiology. *PLoS ONE*, *10*(12), 1–24. https://doi.org/10.1371/journal.pone.0145467

Búsqueda De Agonistas Del Receptor X Hepático En Un Extracto Del Género *Zanthoxylum*

Search For Liver X Receptor Agonists In An Extract From The Genus *Zanthoxylum*

López Niño, D. F.[1], Sandoval Hernández, A. G.[1]

[1]Grupo de Investigación en Neurociencias y muerte celular, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

dlopezni@unal.edu.co

Área temática: Bioquímica.

Palabras clave: Alzheimer, LXR, *Zanthoxylum*, fitoquímica, docking molecular.

En la enfermedad de Alzheimer (EA) hay una acumulación de péptidos amiloide β (Aβ) que forman placas insolubles y neurotóxicas. La remoción de Aβ está mediada ApoE y ABCA1 a través de la vía glinfática. Estas proteínas están reguladas por los receptores X hepáticos (LXR). Recientemente se estudió el efecto de agonistas sobre LXR en modelos murinos, encontrando una actividad significativa y una disminución en la patología amiloide.

En este trabajo se realizó una caracterización fitoquímica de un extracto y fracciones de *Zanthoxylum sp.* por medio de cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas en tándem. Las moléculas encontradas se modelaron por docking molecular para evaluar su actividad agonista de LXRβ y se determinaron sus propiedades farmacocinéticas.

Se encontraron 70 moléculas, de las cuales el 46.4% fueron alcaloides, 11.6% terpenos, 10.1% flavonoides, 7.2% ácidos grasos y en menor proporción carbohidratos, fenoles, fitoesteroles, etc. Muchas de estas moléculas tienen diversos tipos de actividad biológica como antimicrobiana, citotóxica o neuroprotectora. 28 metabolitos se llevaron a docking molecular, encontrando una importante actividad agonista de alcaloides, flavonoides y lignanos. A los 10 compuestos con mayor actividad agonista se les evaluaron las propiedades ADME, encontrando 5 moléculas capaces de atravesar la barrera hematoencefálica, ser sustrato de la glicoproteína P y cumplir la regla de Lipinski. Estos compuestos se encuentran principalmente en las fracciones más apolares y corresponden a las benzofenantridinas sanguinarina, queleritrina y norqueleritrina, la protoberberina tetrahidropalmatina y el compuesto fenólico lusiantridina. Se evaluaron las interacciones intermoleculares ligando-receptor, encontrando interacciones mayoritariamente hidrofóbicas, algunas de ellas con ligandos flexibles, y un puente de H entre la sanguinarina e His435.

Concluyendo, el extracto y las fracciones de *Zanthoxylum sp.* tienen un gran potencial agonista de LXRβ y representan una oportunidad para la investigación en productos naturales y su aplicación como tratamiento para la EA. Se sugiere que, las moléculas modeladas pueden actuar de manera sinérgica, ser las responsables de dicha actividad agonista y tener potencial terapéutico frente a la EA.

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Referencias

Sandoval Hernández, A. G., Restrepo, A., Cardona Gómez, G. P., Arboleda, G. (2016). LXR activation protects hippocampal microvasculature in very old triple transgenic mouse model of Alzheimer's disease. *Neuroscience Letters*, *621*(2016), 15-21. https://doi.org/10.1016/j.neulet.2016.04.007

Patiño, O. J., Prieto, J. A., Cuca, L. E. (2012). Zanthoxylum Genus as Potential Source of Bioactive Compounds en I. Rasooli (Ed.), *Bioactive Compounds in Phytomedicine*, (pp. 185-218). IntechOpen.

El Azul De Toluidina Y Sus Derivados En Asociación Con La Albúmina De Suero Humano Hacia Aplicaciones Fotoquímicas

Toluidine Blue And Derivatives In Association With Human Serum Albumin Towards Photochemical Applications

Melannie García-Sánchez[1], Daniel Torres-Mendoza[2,3,4], Mario Miranda[5,6], Marcos H. Salazar[1,6] y José Robinson-Duggon[1,6*]

[1]Universidad de Panamá, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Departamento de Bioquímica.

[2]Universidad de Panamá, Laboratorio de Bioorgánica Tropical, Universidad de Panamá.

[3]Universidad de Panamá, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Departamento de Química Orgánica, Universidad de Panamá.

[4]Universidad de Panamá Vicerrectoría de Investigación y Postgrado.

[5]Universidad de Panamá, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Departamento de Química Analítica, Universidad de Panamá.

[6]Sistema Nacional de Investigación (SNI), Secretaría Nacional de Ciencia, Tecnología e Innovación.

melanie.garcia@up.ac.pa

Área Temática: Bioquímica.

Palabras claves: fotosensibilizador, Albúmina de Suero Humano, especies reactivas de oxígeno, encapsulación supramolecular, fluorescencia.

El cáncer es una enfermedad crónica que representa uno de los mayores retos para la medicina actual. La terapia fotodinámica (TFD) ha surgido como una estrategia prometedora en el tratamiento de esta enfermedad, combinando la administración de fotosensibilizadores (PS) y la irradiación de luz para generar especies reactivas de oxígeno (ROS) que inducen la muerte selectiva de las células cancerosas. La HSA juega un papel importante en la distribución de fármacos en el sistema circulatorio por lo que es crucial investigar la interacción de fotosensibilizadores con proteínas plasmáticas como la albúmina sérica humana (HSA) para comprender y mejorar la eficacia de la TFD (Sharma et.al., 2014).

En esta investigación, se exploró la purificación y actividad fluorescente del azul de toluidina (TBO^+) y sus derivados, mono (d-TBO^+) y doblemente (dd-TBO^+) desmetilados utilizando la fluorescencia de estado estacionario, la espectroscopía UV-Vis, la espectrometría de masas y se medieron sus actividades fotoquímicas al ser irradiados por medio de electroforesis en gel de poliacrilamida (Robinson-Duggon et.al., 2019b). Así como también su asociación con la HSA en comparación con fármacos competidores como ibuprofeno y warfarina. Del mismo modo, se realizó la encapsulación supramolecular en curcubit[7]urilo y curcubit[8]urilo del d-TBO^+ para evaluar la generación de oxígeno singulete.

Los resultados describieron el sitio de unión con la HSA como el sitio de Sudlow I por la competitividad con la warfarina, la comparación de los rendimientos cuánticos de fluorescencia y generación de oxígeno singulete según cada fotosensibilizador. Se determinó que el dd-TBO^+ genera mayor cantidad de oxígeno singulete y que el d-TBO^+ tiene mayor actividad fluorescente. El estudio proporciona una comprensión más profunda de la interacción entre los PS y la HSA en el contexto de la TFD como método de transporte. Estos resultados contribuyen al desarrollo de futuras investigaciones en enfoques terapéuticos.

Referencias

Robinson-Duggon, J., Mariño-Ocampo, N., Barrias, P., Zúñiga-Núñez, D., Günther, G., Edwards, A. M., Greer, A., & Fuentealba, D. (2019b). Mechanism of Visible-Light Photooxidative Demethylation of Toluidine Blue O. The Journal Of Physical Chemistry. A/The Journal Of Physical Chemistry. A., 123(23), 4863-4872. https://doi.org/10.1021/acs.jpca.9b03588

Sharma, A. S., Anandakumar, S., & Ilanchelian, M. (2014). A combined spectroscopic and molecular docking study on site selective binding interaction of Toluidine blue O with Human and Bovine serum albumins. Journal Of Luminescence, 151, 206-218. https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2014.02.009

Análisis Metabolómico Basado En Espectrometría De Masas De Alta Resolución Revela Diferencias Metabólicas Entre Células Planctónicas Y Sésiles De *Salmonella* Enteritidis ATCC 13076

Metabolomic Analysis Based On High-Resolution Mass Spectrometry Reveals Metabolic Differences Between Planctonik And Sessile Cells Of *Salmonella* Enteritidis ATCC 13076

Hidalgo, W.[1,2], **Guillín, Y.**[2], **Ortíz, C.**[2]

[1]Grupo de Investigación en Compuestos Orgánicos de Interés Medicinal, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.

[2]Grupo de Investigación en Bioquímica y Microbiología, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.

whidalgo@uis.edu.co

Área temática: Bioquímica.

Palabras clave: Biofilm, células planctónicas, células sésiles, metabolómica, LC/MS.

Las infecciones por *Salmonella* representan una causa significativa de muerte a nivel mundial. Además, bajo condiciones apropiadas, la mayoría de las bacterias pueden formar biofilm, una característica que contribuye a la resistencia a los antibióticos.

Este estudio comparó los perfiles metabólicos de células planctónicas y sésiles de *Salmonella* Enteritidis utilizando metabolómica. Los extractos metanólicos fueron analizados mediante cromatografía líquida de ultra alta eficiencia acoplada a espectrometría de masas de alta resolución (UHPLC-MS-Orbitrap). La matriz de datos fue analizada mediante métodos estadísticos uni- y multivariados.

Posteriormente, se identificaron características metabólicas diferenciales entre los grupos de estudio e integradas para identificar posibles vías metabólicas para cada uno de los perfiles metabólicos. En total, se identificaron 123 metabolitos de forma presuntiva. Entre los metabolitos positivamente modulados en las células planctónicas se encontraron aminoácidos como prolina, fenilalanina, putrescina y cadaverina, mientras que, en las células sésiles se encontraron metabolitos como lisina, adenosina y el citrato, entre otros. El análisis de enriquecimiento de vías reveló cambios metabólicos en 11 vías, incluyendo principalmente el metabolismo de purinas y pirimidinas, el metabolismo de arginina y prolina, y el metabolismo de la vitamina B6. Finalmente, el análisis identificó cambios en la modulación de metabolitos en células planctónicas y sésiles.

Estos cambios estaban asociados con la reprogramación metabólica necesaria para la formación de biofilm, ya que muchos metabolitos identificados, principalmente aminoácidos, purinas y pirimidinas, son importantes para la formación y maduración de esta biopelícula.

Referencias

Srinivasan, R., Santhakumari, S., Poonguzhali, P., Geetha, M., Dyavaiah, M., & Xiangmin, L. (2021). Bacterial Biofilm Inhibition: A Focused Review on Recent Therapeutic Strategies for Combating the Biofilm Mediated Infections. *Frontiers in microbiology*, *12*, 676458. https://doi.org/10.3389/fmicb.2021.676458

Haggarty, J., & Burgess, K. E. (2017). Recent advances in liquid and gas chromatography methodology for extending coverage of the metabolome. *Current opinion in biotechnology*, *43*, 77–85. https://doi.org/10.1016/j.copbio.2016.09.006

Identificación, Aislamiento Y Caracterización De Toxinas Que Afectan El Canal De Potasio (KTx) Del Escorpión *Centruroides bicolor*

Rodríguez, A.[1,2], Samudio, O.[1,2], Cleghorn, J.[2] , Acosta, H.[2], Corzo, G.[3], Hernández, L.[3], Salazar, M.[1,2]

[1]Universidad de Panamá, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Departamento de Bioquímica, Ciudad de Panamá, Panamá.

[2]Universidad de Panamá, Centro de Investigación e Información de Medicamentos y Tóxicos (CIIMET), Facultad de Medicina, Ciudad de Panamá, Panamá.

[3]Departamento de Medicina Molecular y Bioprocesos, Instituto de Biotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Cuernavaca, Morelos, México.

anthony.rodriguez02@up.ac.pa

Área Temática: Bioquímica.

Palabras claves: *Centruroides bicolor*, escorpiones, KTx, HPLC, SDS-PAGE.

La anatomía de los escorpiones ha evolucionado para desarrollar glándulas venenosas especializadas en la caza y la defensa. La especie *Centruroides bicolor*, perteneciente a la familia Buthidae, habita en Centroamérica, específicamente en Costa Rica y Panamá. El veneno de los escorpiones contiene una mezcla de varios compuestos, incluidos muchos componentes peptídicos con una amplia gama de masas moleculares. Los componentes activos suelen ser pequeñas toxinas peptídicas que modulan canales iónicos de la membrana plasmática de diversas células. Las toxinas más estudiadas son las que afectan el canal de K+ (KTx) debido a que pueden utilizarse como herramientas moleculares eficientes para aprender sobre la estructura y función de los canales iónicos. Para caracterizar estas toxinas, el veneno se extrae mediante estímulos manuales al telson del escorpión. En la estimulación manual, se emplea un vidrio de reloj revestido de papel parafinado, seguido de un lavado con agua desionizada. El veneno se liofiliza y almacena a -40 °C. Posteriormente, 2 mg de veneno se analizan mediante cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) en fase reversa, separándose en una columna C18 con un gradiente de elución compuesto por Agua/0.1% TFA (A) y Acetonitrilo/0.1% TFA (B). El programa de elución específico inicia con 0% de (B) durante 0-5 minutos, seguido de un aumento gradual a 20% (B) entre 5-25 minutos, y finalmente a 60% (B) entre 25-75 minutos, monitoreando las fracciones a 230 y 280 nm. Las fracciones de interés se concentran y solubilizan en agua desionizada. Luego, se analizan mediante electroforesis en gel de poliacrilamida con SDS-PAGE en condiciones reductoras, usando azul de Coomassie para la visualización. En conclusión, con el uso de técnicas avanzadas de extracción y análisis, se ha logrado aislar y caracterizar con precisión las KTx presentes en el veneno de *Centruroides bicolor*. Estos hallazgos representan un paso importante hacia el desarrollo de tratamientos médicos y farmacológicos innovadores, aprovechando las propiedades biológicas de estos compuestos para abordar diversas enfermedades y condiciones de salud.

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Referencias

Rodríguez de la Vega, R.C., Vidal, N., &Possani, L. (2013). Scorpion Peptides. En A.J. Kastin (Ed.), Handbook of Biologically Active Peptides (pp. 423–429). Elsevier Inc.

Salazar, M. H., Arenas, I., Corrales-García, L. L., Miranda, R., Vélez, S., Sánchez, J., Mendoza, K., Cleghorn, J., Zamudio, F. Z., Castillo, A., Possani, L. D., Corzo, G., & Acosta, H. (2018). Venoms of Centruroides and Tityus species from Panama and their main toxic fractions. Toxicon: official journal of the International Society on Toxinology, 141, 79–87. https://doi.org/10.1016/j.toxicon.2017.11.013

Uso De Un Péptido De Unión A La Integrina αvβ6 Para La Detección De Células Cancerosas Que La Expresan

An αvβ6 Integrin-Binding Peptide Used For Detecting Cancer Cells That Express It

Benavides, D.[1,2], Perdomo, D.[1,2], Urquiza, M.[1,2], Guzmán, F. [3], Bianchet, M. [4]

[1]Grupo de Investigación en Hormonas, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Colombia.

[2]Semillero de Bioquímica, Biología y Biología Molecular, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Colombia.

[3]Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile.

[4] Biophysics and Biophysical Chemistry Department. John-Hopkins University. Baltimore, Maryland, Estados Unidos de América

dabenavides@unal.edu.co, dperdomoj@unal.edu.co

Área temática: Bioquímica.

Palabras claves: Integrina αvβ6, péptido, cáncer.

El cáncer es una de las principales causas de muerte a nivel mundial, representando casi 10 millones de muertes en 2020. El éxito del tratamiento depende de la detección temprana del tumor y de la eliminación completa de las células tumorales. Actualmente, el tratamiento de tumores sólidos representa un desafío debido a su microambiente inmunosupresor, por lo que surge la necesidad de buscar nuevos métodos de alta especificidad y selectividad. La integrina αvβ6 es una proteína altamente expresada en diversos tumores sólidos cuya expresión está asociada con una menor supervivencia en pacientes debido a su papel, la proliferación y metástasis celular.

Péptidos de unión a la integrina αvβ6 fueron diseñados y sintetizados; la unión a esta proteína fue evaluada a través de docking molecular con Cluspro, determinando la energía de unión de los péptidos rodaminanos y no rodaminados. Posteriormente se realizó un análisis por microscopía de fluorescenciael de la unión de los péptidos en las líneas celulares (SK-MEL, HeLa, HEK). Se midió la constante de afinidad de estos péptidos a la integrina αvβ6 usando SPR. Para la evaluación del mecanismo de muerte celular inducida por el péptido, se hizo una RT-qPCR para la medición de los genes relacionados con la vía TGF-β y apoptótica. Finalmente, se realizaron constructos computacionales, por medio de las herramientas Swiss Pro y Robetta, de un scFv el cual fue modificado en el FAB con la secuencia del péptido de unión a la integrina αvβ6.

Se determinó que la unión entre el péptido y la integrina αvβ6 era energéticamente favorable por medio de los análisis computacionales realizados, lo cual fue posteriormente verificado a través de microscopía. La constante de afinidad hallada fue de <30 nM. Adicionalmente, se evidencian cambios en la expresión génica relacionada con muerte celular después del tratamiento con los péptidos. Finalmente, se obtuvieron constructos computacionales en donde se observa que la unión de la integrina αvβ6 genera valores favorables energéticamente.

Los péptidos sintetizados demuestran una unión específica y de alta afinidad por la integrina αvβ6 con potencial de ser utilizados para detección y tratamiento de tumores que expresan esta integrina usando inmunoterapias dirigidas.

Referencias

Urquiza, M., Guevara, V., Diaz-Sana, E., & Mora, F. (2020). The Role of αvβ6 Integrin Binding Molecules in the Diagnosis and Treatment of Cancer. En Current Organic Chemistry (Vol. 24, Issue 21, pp. 2393-2411). Bentham Science Publishers Ltd. https://doi.org/10.2174/1385272824999200528124936

Urquiza, M., Lopez, R., Patiño, H., Rosas, J. E., & Patarroyo, M. E. (2005). Identification of three gp350/220 regions involved in Epstein-Barr virus invasion of host cells. The Journal of biological chemistry, 280(42),35598–35605. https://doi.org/10.1074/jbc.M504544200

Péptidos Quiméricos Anti-αvβ6 y NF-κB Inducen Muerte Celular Regulada En Líneas Celulares Tumorales De Manera Selectiva Según El Nivel De Expresión De La Integrina αvβ6

Chimeric Anti-αvβ6 And NF-κB Peptides Induces Regulated Cell Death In Tumor Cell Lines Selectively Based On αvβ6 Integrin Expression Levels

Díaz-Sana, E [1,2], Urquiza, M [1,2], Guzmán, F[3]

[1]Grupo de Investigación en Hormonas, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

[2]Semillero de Bioquímica, Biofísica y Biología Molecular, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

[3]Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile

erdiazs@unal.edu.co

Área temática: Bioquímica.

Palabras clave: Integrina αvβ6, Factor Nuclear κβ, Péptidos quiméricos, Apoptosis, Cáncer.

La invasión, migración y metástasis celular en ciertos tipos de tumores son favorecidas por la desregulación en la señalización del factor nuclear κβ y la sobreexpresión de la integrina αvβ6. La presencia de esta integrina se asocia con la malignidad de las lesiones y un mal pronóstico en los pacientes, lo que la convierte en un biomarcador y objetivo terapéutico importante. El factor nuclear κβ (NF-κβ) controla la transcripción de genes involucrados en la respuesta inmunitaria y otras respuestas celulares como adhesión, diferenciación y apoptosis. La activación inapropiada o excesiva de NF-κβ está implicada en diversas enfermedades inflamatorias crónicas, autoinmunes y en el desarrollo y progresión del cáncer, especialmente en carcinomas de mama, pulmón, boca, estómago, endometrio, páncreas y ovario. El papel de estos biomarcadores en el cáncer y la regulación espaciotemporal de αvβ6 presenta un escenario prometedor para el diseño de moléculas antitumorales.

Evaluamos el efecto de péptidos quiméricos sintetizados con un motivo de unión a αvβ6 y un motivo inhibidor de NF-κβ en la inducción de muerte celular regulada (MCR) en líneas celulares para comprender el funcionamiento de los péptidos a nivel biológico y molecular, y obtener información sobre su potencial para controlar procesos tumorales de manera específica y con un efecto citotóxico limitado en células normales.

Mediante FACS y microscopía de fluorescencia se observó que los péptidos quiméricos se unen en mayor proporción a células de cáncer HeLa, MCF-7, SK-MEL-23, A549 y CCRF-CEM, en comparación con líneas celulares normales como HEK 293, fibroblastos y PBMCs. También, modifican el potencial de membrana mitocondrial, principalmente en las líneas celulares tumorales y promueven la expresión de marcadores de apoptosis en algunas células tumorales, pero no en células normales. Finalmente, por qPCR y WB se observó la expresión diferencial de genes y proteínas involucradas en la supervivencia celular.

Estos hallazgos sugieren que los péptidos quiméricos tienen un potencial significativo como agentes antitumorales específicos, con efectos citotóxicos mínimos en células no cancerosas.

Referencias

Collins, P., Grassia, G., Colleran, A., et al. (2015). Mapping the interaction of B cell leukemia 3 (BCL-3) and nuclear factor κB (NF-κB) p50 identifies a BCL-3-mimetic anti-inflammatory peptide. Journal of Biological Chemistry. https://doi.org/10.1074/jbc.RA115.665887

Urquiza, M., Suarez, J., Lopez, R., Vega, E., Patino, H., Garcia, J., Patarroyo, M. A., Guzman, F., & Patarroyo, M. E. (2004). Identifying gp85-regions involved in Epstein-Barr virus binding to B-lymphocytes. Biochemical and Biophysical Research Communications, 319(1), 221–229. https://doi.org/10.1016/j.bbrc.2004.04.177

Evaluacion Del Comportamiento De Gymnodinium catenatum y Alexandrium sp. En Los Medios De Cultivo GSe y f/2 Y Su Perfil Lipídico

Evaluation Of The Behavior Of Gymnodinium catenatum and Alexandrium sp. IN GSe and f/2 Culture Media And Its Lipid Profile

Moscoso-Hernandez, E.A.[1,3], Band-Schmidt, C.J.[2], Leyva-Valencia, I.[2], Hernández-Alfonso, J.R.[2], Batista-Ceballos, A.I.[1,3], Hernández-Sandoval, F.E.[4], Bustillos-Guzmán, J.J.[4]

[1]Escuela de Química, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad Autónoma de Chiriquí (UNACHI), David, Chiriquí, Panamá.

[2]Departamento de Plancton y Ecología Marina, Centro Interdisciplinario de Ciencias Marinas (CICIMAR), Instituto Politécnico Nacional (IPN), La Paz, Baja California Sur, México.

[3]Centro de Investigación de Productos Naturales y Biotecnología, Universidad Autónoma de Chiriquí, David, Chiriquí, Panamá.

[4]Laboratorio de Microalgas Nocivas, Centro de Investigaciones Biológicas del Noroeste (CIBNOR), La Paz, Baja California Sur, México.

edgardo.moscoso@unachi.ac.pa

Área Temática: Bioquímica.

Palabras claves: Dinoflagelados, biotoxinas, pigmentos, floraciones algales nocivas, cultivo.

Los dinoflagelados, un grupo de protistas flagelados con aproximadamente 2.400 especies, pueden resultar tóxicos, debido a su proliferación junto a bacterias y ciliados, produciendo "floraciones algales nocivas" (FANs) o "mareas rojas", que pueden afectar a los humanos, mediante la cadena trófica. Durante los últimos años, en Panamá pocos son los estudios reportados sobre estas floraciones, los existentes son a nivel biológico, y no hay estudios reportados sobre las toxinas de estos organismos. Este proyecto tuvo como objetivo realizar cultivos de dinoflagelados en dos medios diferentes para observar diferencias en el crecimiento y en la producción de toxinas paralizantes, proporcionando una base para futuro.

Se realizaron cultivos, para el conteo celular se realizó con una cámara de Sedgwick-Rafter, un microscopio óptico y contadores mecánicos mientras que para el análisis de toxinas y pigmentos se utilizó un HPLC con FLD y DAD.

Se utilizaron los medios f/2 y GSe enriquecido con lombricompostaje, donde se realizaron cultivos por triplicado a 24±1°C, 34% de humedad, con un fotoperiodo de 12:12 luz:oscuridad. Se tomaron muestras de 2mL por réplica para el conteo celular y la curva de crecimiento, estas se fijaron con Lugol ácido. En el análisis de pigmentos y toxinas, los cultivos en su fase exponencial tardía se filtraron y maceraron antes de proceder a la extracción utilizando 2mL de acetona grado HPLC y 2mL de ácido acético 0.03N, respectivamente. Las muestras se almacenaron a -20°C un día antes del análisis.

Ambas especies tienen mejor crecimiento en medio GSe, en el medio f/2 no se observó crecimiento de *Alexandrium sp*. Para el análisis de *Alexandrium sp*, en GSe no se detectaron toxinas paralizantes, mientras que *G. catenatum* presentó mayor concentración en f/2 (39.88ng/mL) que en GSe (21.26ng/mL) en promedio.

En investigaciones similares, se observa que algunas especies de dinoflagelados no tienen buen crecimiento en medio f/2, principalmente especies del género *Alexandrium,* y que en este mismo medio las concentraciones de toxinas paralizantes son mayores.

En los organismos estudiados podemos ver que existe una mejor adaptación al medio GSe en comparación al medio f/2, dato conveniente para el cultivo de los mismos en futuras investigaciones.

Referencias

González, A.; Fábrega, J.; & Broce, K. (2017). *Monitoreo de Dinoflagelados Causantes de Ciguatera en las Aguas de Punta Galeta, Colón, Panamá*. Universidad Tecnológica de Panamá (Panamá). https://ridda2.utp.ac.pa/handle/123456789/4400

Hernández-Sandoval, F.E.; Bustillos-Guzmán, J.J.; Band-Schmidt, C.J.; Núñez-Vázquez, E.J.; López-Cortés, D.J.; Fernández-Herrera, L.J.; Poot-Delgado, C.A. & Moreno-Legorreta, M. (2022). Effect of Different N:P Ratios on the Growth, Toxicity, and Toxin Profile of Gymnodinium catenatum (Dinophyceae) Strains from the Gulf of California. *Toxins 2022, 14, 501*. https://doi.org/10.3390/toxins14070501

Extracción Y Análisis De Pigmentos De Hongos Filamentosos Deteriorantes De Las Encuadernaciones En Pergamino De Unidades Bibliográficas Del Fondo Antiguo De La Biblioteca Nacional De Colombia (BNC)

Extraction And Analysis Of Filamentous Fungal Pigments From The Parchment Bindings Of Bibliographic Units Of The Ancient Collection Of The National Library Of Colombia (NLC)

Sarmiento S. [1], **Villalba L.S.**[2], **Maya M.** [1]

[1]Laboratorio de Bioquímica y Biología Molecular de las Micobacterias. Universidad Nacional de Colombia, Bogotá., Colombia.

[2]Centro de Conservación Biblioteca Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

ssarmientop@unal.edu.co

Área Temática: Bioquímica.

Palabras clave: **biodeterioro; pergamino; hongos filamentosos; pigmentos; conservación.**

El estudio de los agentes de deterioro del material documental es fundamental para consolidar estrategias encaminadas a la preservación de la memoria histórica de la humanidad (Molina & Borrego, 2011). En el deterioro participan diferentes agentes biológicos como los hongos filamentosos, que producen impacto significativo en soportes como el pergamino, este, importante fuente de carbono y nitrógeno utilizad por los hongos filamentosos para su crecimiento. Lo anterior, genera biodeterioro por mecanismos como la producción de metabolitos, caso de los pigmentos difusibles.

Por lo tanto, es necesario identificar los géneros fúngicos deteriorantes, sus mecanismos de acción y los metabolitos producidos, con el fin de formular metodologías adecuadas para conservar e intervenir el patrimonio documental.

Se seleccionaron pergaminos con manifestaciones de biodeterioro y se realizaron muestreos microbiológicos directos e indirectos con los medios de cultivo PDA y DG18. Se aislaron colonias fúngicas con evidencia de pigmentos y se identificaron por descripciones macroscópicas y microscópicas. Dichas especies se cultivaron en medios definidos de sales minerales y glucosa, para extraer y purificar los pigmentos difusibles.

Se aislaron y purificaron 84 morfotipos de hongos filamentosos asociados al biodeterioro. De estos, 16 morfotipos mostraron la capacidad de producción de pigmentos, se identificaron géneros como *Mycelia Sterilia*, *Aspergillus spp*., *Penicillium spp*., *Epicoccum spp*. y *Cladosporium spp*. Los 20 pigmentos extraídos de distintas tonalidades se analizaron por técnicas cromatográficas indicando que pertenecen a grupos químicos con diferentes polaridades como carotenoides, quinonas e hidroxiquinonas.

Se confirmó la presencia de un porcentaje significativo de microorganismos que pueden causar deterioro en ambientes con una humedad relativa baja. Se encontraron correlaciones con la actividad de agua de los medios, el contenido de algunas sales minerales y la producción de pigmentos.

La presente investigación proporcionó una visión de la diversidad de pigmentos difusibles producidos por hongos filamentosos asociados con el biodeterioro de soporte en pergamino, lo que contribuirá a proponer procesos de intervención para atenuar las manchas pigmentadas en documentos patrimoniales.

Referencias

Marín, M., Villalba, L.S, & Arévalo, C. (2015). Extracción y caracterización parcial de pigmentos de hongos biodeteriorantes aislados de patrimonio documental cartográfico. Conservamos, 9.

Sterflinger, K., & Pinzari, F. (2011). The revenge of time: fungal deterioration of cultural heritage with particular reference to books, paper and parchment. Environmental Microbiology, 14(3), 559-566. https://doi.org/10.1111/j.1462-2920.2011.02584.

Molina, A., & Borrego, S. (2011). Caracterización de hongos aislados de mapas conservados en el Archivo Nacional de la República de Cuba. Ge-conservación, 6.

Diseño de Primers Para Genes Relacionados Con La Síntesis De Compuestos De Interés En *Cannabis Sativa* Var. Mango Biche

Primer Design For Genes Related To The Synthesis Of Compounds Of Interest In *Cannabis sativa* Var. Mango Biche

Jiménez Candela, C.A.[2], Ardila-Barrantes H.D.[1], Avellaneda-Torres, L.M[1], Martínez-González, A.P.[2]

[1]Grupo de investigación - Estudio de actividades metabólicas vegetales, Departamento de Química. Facultad de Ciencias. Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C., Colombia.
[2]Grupo de investigación - Estudio de actividades metabólicas vegetales, Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia.

hdardilab@unal.edu.co

Área Temática: Bioquímica.
Palabras clave: PCR In Silico, qPCR, Bioinformática, cannabinoides, tetrahidrocannabinol, cannabidiol.

La *Cannabis sativa* es una planta con potenciales efectos medicinales. En la zona rural del municipio de Sibaté (Cundinamarca, Colombia), la comunidad produce ungüentos medicinales a partir de la *Cannabis sativa* Var. Mango Biche. Sin embargo, el desarrollo de sus productos presenta dificultades puesto que los suelos de la zona no han mostrado aptitudes adecuadas para el cultivo de la planta. Como una alternativa ante estas dificultades se ha propuesto explorar el uso de humus de lombriz y compost de estiércol de cerdo, como estrategia para mejorar la fertilidad del suelo.

Se conoce que las propiedades medicinales de la *Cannabis sativa* está asociada a la presencia de metabolitos sintetizados por la ruta de los cannabinoides, en la cual en los últimos pasos puede sintetizar el tetrahidrocannabinol (THC) mediante el enzima ácido tetrahidrocanabinólico sintasa (THCAS) y/o cannabidiol (CBD) mediante el enzima ácido cannabidiolico sintasa (CBDAS). Sin embargo, no se conoce cuál es el efecto del uso de estos abonos orgánicos en los niveles de dichos compuestos con actividad de la planta, ni tampoco en los niveles de expresión de los genes codificantes para dichas enzimas. En el presente trabajo se diseñaron primers que pueden ser usados para determinar los niveles transcripcionales para estos genes centrales para la biosíntesis de cannabinoides, mediante la cuantificación relativa utilizando PCR en tiempo real.

En el diseño de primers, se empleó la herramienta bioinformática Primer3Plus donde se ajustaron diferentes parámetros como la longitud del amplicón (16-20pb), temperatura de fusión (Tm 55-65°C) y Contenido de GC (40-60%), a partir de esto se generaron múltiples parejas de primers, las cuales fueron verificadas empleando el software UGENE que permite realizar la PCR *in silico*, para confirmar su especificidad. Se verificó que los primers no presentaran alineamientos con secuencias no deseadas del genoma de *Cannabis sativa* y que no formaran como bucles o dímeros que pudieran interferir con la PCR. Para realizar la cuantificación relativa se seleccionaron los genes de referencia 18s rRNA y EF-1α, los cuales de acuerdo con los reportes han sido los más estables, incluso al determinarse en diferentes partes de la planta y con diversos tipos de estrés. Las secuencias de los genes de interés se tomaron a partir de artículos reportados y de bases de datos públicas (GenBank).

Los primers obtenidos (una pareja por cada gen de interés) mostraron alta especificidad y estabilidad termodinámica, resultados que indican que los primers son adecuados para la amplificación específica de los genes de estudio y de los genes de referencia seleccionados en *Cannabis sativa*.

Referencias

Deguchi, M., Potlakayala, S., Spuhler, Z., George, H., Sheri, V., Agili, R., et al (2021). Selection and validation of reference genes for normalization of qRT-PCR data to study the cannabinoid pathway genes in industrial hemp (P. K. Subudhi, Ed.). Public Library of Science (PLoS). https://doi.org/10.1371/journal.pone.0260660

Happyana, N., & Kayser, O. (2016). Monitoring Metabolite Profiles of Cannabis sativa L. Trichomes during Flowering Period Using 1H NMR-Based Metabolomics and Real-Time PCR. Georg Thieme Verlag KG. https://doi.org/10.1055/s-0042-108058

Agradecimientos a la Universidad Nacional de Colombia por la financiación del proyecto con código Hermes 58982

Hepcidina Como Marcador Inflamatorio, Y Su Relación Con El Fierro, Transferrina Y Ferritina En Pacientes Post COVID-19 De Villa El Salvador, Lima-Perú

Hepcidin As An Inflammatory Marker, And Its Relationship With Iron, Transferrin And Ferritin In Post-COVID-19 Patients From Villa El Salvador, Lima, Peru

Parreño, J.[1,2], Guerra, G.[1,2], Hernández, L.[1,2], Ortiz, J.[1,2], Carhuapoma, M.[1,2], León, E.[1,2], Guerra, A.[1,2], Medina, D.[1], Juan de Dios, M.[1], Gonzales, S. [1,2], Vizcarra, J.[1], Otero, V.[1], Neyra, R. [1], Pérez, E.[2], Perez, K.[2], Zurita, F.[1], Diaz, A.[2], Salvador, G.[1], Zang, J.[1]

[1]Institución de Procedencia: Facultad de Farmacia y Bioquímica. Universidad Nacional Mayor de San Marcos.

[2]Grupo de Investigación: Análisis Bioquímicos Clínicos y Toxicológico en Salud y Enfermedad (ANBICLIT).

jparrenot@unmsm.edu.pe

Área Temática: **Bioquímica.**

Palabras clave: hepcidina, fierro, transferrina, ferritina.

Introducción, las citoquinas producto de los procesos inflamatorios en los pacientes con COVID-19 estimulan la síntesis de hepcidina, que al unirse al hierro absorbido regula su metabolismo y homeostasis. La transferrina cargada de hierro se internaliza en una endosoma y se libera para formar parte de la molécula de hemoglobina o almacenándose en forma de ferritina. Materiales, equipos espectrofotómetro y ELISA reactivos para la determinación de hepcidina y ferritina por el método inmunoenzimático de ELISA, hierro Test fotométrico con Ferene, transferrina, ensayo turbidimétrico en muestras de suero sanguíneo. Metodología, modelo cuantitativo, no experimental, analítico, transversal y correlacional. Resultados, 180 pruebas hematológicas y bioquímicas, luego de 3 meses del alta. El grupo etario más frecuente fue adultos 44,4 % y sexo femenino 60%. Para hepcidina se encontró valores disminuidos en 15 % adultos y 14,8 % sexo femenino, hierro sérico en adultos mayores fue del 4,8 % con valores disminuidos y 2,5 % con valores aumentados. Para transferrina el 75,9 % jóvenes y 83,3 % mujeres con valores disminuidos. Para ferritina se encontró en jóvenes 10,3 % valores aumentados y 7,5 % disminuidos en adultos. Discusión, la disminución de hierro durante una infección restringe la disponibilidad de hierro para los patógenos en crecimiento al eliminarlo dentro del sistema reticuloendotelial, con el objetivo de controlar la infección, por ende, es más probable que la reducción de hierro sérico sea una consecuencia de una inflamación avanzada. Un factor que influye en la hospitalización relacionada con COVID-19 sería el estado de hierro pre existente del paciente y su gravedad, en comparación con la enfermedad leve; esta característica persistió incluso después de un periodo de 2 meses desde el inicio de la enfermedad encontrándose niveles de hierro disminuido, los casos graves niveles más altos de ferritina, la diferencia estadística para la transferrina no fue significativa entre los casos graves y no graves, encontrando que los graves tenían niveles séricos más altos de ferritina, y más bajos de fierro. Conclusiones, se encontró una correlación directa y significativa de intensidad débil entre la hepcidina y la ferritina, no se observó relación con fierro y transferrina.

Referencia

Zeinivand, M., Jamali-Raeufy, N., Zavvari, F. (2022). The beneficial role of Hepcidin peptide inhibitor in improved the symptoms of COVID-19 in diabetics: anti-inflammatory and potential therapeutic effects. *Journal of Diabetes & Metabolic Disorders*. 21(2). 1797-1807. https://doi.org/10.1007/s40200-022-01053-9

Suriawinata, E., Mehta, K. J. (2023) Iron and iron-related proteins in COVID-19. *Clinical and Experimental Medicine*. (1)23. 969-991. https://doi.org/10.1007/s10238-022-00851-y

Estudio De Los Procesos Fotosensibilizados De Un Derivado De Azul De Toluidina Sobre Macromoléculas De Importancia En La Terapia Fotodinámica

Study Of Photosensitizing Processes Of A Toluidine Blue Derivative On Macromolecules Of Importance In Photodynamic Therapy

Querini-Sanguillén, W.[1], Otero-González, J.[1], Torres-Mendoza, D.[2,3,4], Miranda, M.[5,8], Salazar, M.[1], Fuentealba, D.[6], Castro, E.[7,8], Ramos, C.[7] y Robinson-Duggon, J.[1,8]

[1] Universidad de Panamá, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Departamento de Bioquímica, Panamá, Panamá.

[2]Universidad de Panamá, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Laboratorio de Bioorgánica Tropical, Panamá, Panamá.

[3]Universidad de Panamá, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Departamento de Química Orgánica, Panamá, Panamá.

[4]Universidad de Panamá, Vicerrectoría de Investigación y Postgrado, Panamá, Panamá

[5]Universidad de Panamá, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Departamento de Química Analítica, Panamá, Panamá.

[6]Laboratorio de Química Supramolecular y Fotobiología, Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile.

[7]Universidad de Panamá, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Departamento de Genética y Biología Molecular, Panamá, Panamá;

[8]Sistema Nacional de Investigación (SNI), Secretaría Nacional de Ciencia, Tecnología e Innovación (SENACYT), Panamá, Panamá.

whitney.querini@up.ac.pa

Área Temática: Bioquímica.

Palabras clave: Terapia Fotodinámica, Azul de Toluidina, fotosensibilizador, especies reactivas de oxígeno, macromoléculas biológicas.

La Terapia Fotodinámica (TFD) se ha convertido en una elegante y prometedora alternativa terapéutica para el tratamiento del cáncer, menos invasiva y más selectiva. El fundamento consiste en la irradiación selectiva de un fotosensibilizador (FS), en presencia de oxígeno molecular, que se incorpora en el tejido tumoral generando especies reactivas de oxígeno (ROS), especialmente oxígeno singulete ($^1O_2$). Como consecuencia, induce la muerte de las células cancerosas. En estudios anteriores, se ha utilizado el Azul de Toluidina (TBO^+) como fotosensibilizador, sin embargo, la generación de $^1O_2$ por TBO^+ se ve limitada debido a rutas fotooxidativas competitivas. Durante la irradiación de TBO^+, se producen desmetilaciones, así como otras reacciones, formando diferentes fotoproductos.

Para mejorar su eficacia, se realizó la síntesis fotoquímica y purificación por Cromatografía en Capa Fina (TLC) del derivado doblemente desmetilado (dd-TBO^+). Seguidamente, su encapsulación supramolecular en Cucurbit[7]urilo y Cucurbit[8]urilo. Además, se llevaron a cabo experimentos para evaluar los procesos fotosensibilizados de dd-TBO^+ sobre macromoléculas de importancia biológica, específicamente la Albúmina de Suero Humano (HSA), la enzima Superóxido Dismutasa (SOD) y la Catalasa (CAT). La fotooxidación de estas macromoléculas se analizó mediante fluorescencia en estado estacionario, observando el apagamiento del residuo de aminoácido triptófano y electroforesis en gel de poliacrilamida para identificar los productos de degradación.

Los resultados mostraron que la encapsulación supramolecular de dd-TBO^+ en Cucurbiturilos modificó significativamente sus propiedades fotofísicas y fotoquímicas, protegiéndolo de la fotodegradación y mejorando su fotoactividad. La fotooxidación de HSA, SOD y CAT por dd-TBO^+ demostró que este derivado tiene la capacidad de generar ROS efectivamente, afectando estas macromoléculas. Este hallazgo es crucial, porque la HSA es la proteína más abundante en el plasma sanguíneo y actúa como transportador de fármacos, mientras que SOD y CAT son enzimas antioxidantes con un papel citoprotector en las células que han sido sometidas a la TFD.

La modificación y formación de complejos de inclusión de TBO^+ como dd-TBO^+ intensificó la generación de $^1O_2$ y la eficiencia de la fotooxidación de macromoléculas importantes en la TFD. Este estudio confirma el potencial uso de este nuevo fotosensibilizador en aplicaciones clínicas de TFD, ofreciendo una base sólida para futuras investigaciones.

Referencias

Robinson-Duggon, J., et al. (2019). Mechanism of Visible-Light Photooxidative Demethylation of Toluidine Blue O. The Journal of Physical Chemistry. A., 123(23), 4863-4872. https://doi.org/10.1021/acs.jpca.9b03588

Robinson-Duggon, J., et al. (2017). Potential Applications of Cucurbit[n]urils Inclusion Complexes in Photodynamic Therapy. Israel Journal of Chemistry, 58(3-4), 199-214. https://doi.org/10.1002/ijch.201700093

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Química Plegada: Una Nueva Configuración Para Aprender Química

Folded Chemistry: New Setup For Learning Chemistry

Ramírez, A.[1], Torres, G.[2], Barragán, A.[2]

[1]Grupo de investigación en Catálisis, Universidad del Cauca, Popayán, Colombia.

[2] Puntoaparte Editores, Bogotá, Colombia.

aramirez@unicauca.edu.co

Área Temática: Enseñanza de la Química.

Palabras clave: Enseñanza de la química, Aprendizaje de la química, Historietas.

La química se cataloga como una disciplina fundamental ya que nos permite explicar la vida a nivel molecular. Sin embargo, la enseñanza esta siempre se enfrenta al desafío de que la mayoría de los estudiantes no están motivados o interesado en este tema lo cual ha permitido que continuamente se presentes enfoques para mejorar su enseñanza y a su vez inspirar el interés de los estudiantes hacia ella.

En el trabajo magistral *Making Chemistry Fun to Learn* se establecen tres estrategias para mejorar el aprendizaje de la química: i) uso de presentaciones amigables, ii) uso de analogías y iii) correlación con la vida diaria. Un concepto que nos permite trabajar estas estrategias en su conjunto es el uso de historietas o *cartoons*, con las cuales se logra no solo el interés del estudiante sino también se convierte en una forma util de explicar conceptos. En la literatura podemos encontrar varias muestras de ello, siendo sin lugar a duda *ChemScrapes* (*Chemistry Cartoons …for Chemists*, 2023) y *The Cartoon Guide to Chemistry* las mejores representantes. La primera, empezó como una colección de dibujos animados y ya para el 2017, *ChemScrapes* y *Chemical and Engineering News* se unieron para producir *Sketch Chemistry*, un panel mensual regular que aparece en las versiones impresa y en línea de la revista (*Sketch chemistry*, 2023). Con relación a la obra de Gonick y Criddle (2005), la guía explica con ilustraciones sencillas, claras y divertidas la historia y los conceptos básicos de la química.

Todo lo anterior inspiró para que los autores crearan una pieza editorial ilustrada en estilo cómic e impresa en formato plegable (Química plegada, 2021) con la cual logran combinar de manera única las tres estrategias propuestas por Wu & Foos. Esta nueva configuración para aprender química es una historia compuesta de seis capítulos, en donde en cada capítulo se aborda la explicación de un concepto, entre los cuales están el de *catalizadores* y el de *quiralidad*. Para ellos se ha creado una "configuración especial" $1d^6$ y $2d^6$, lo que indica que son los capítulos 1 y 2 de los 6 que tiene el total de la historia. Además, los diferentes capítulos se interconectan entre ellos, lo cual le da una continuidad a la historia, siendo este el factor más innovador de la propuesta, pues al leerlo Usted quera saber de qué se trata el volumen $3d^6$, de cómo finaliza la historia y de cómo se entrelazan, a través de conceptos, los diferentes personajes de la historia.

Los dos ejemplares de la química plegada han demostrado que la enseñanza de la química se puede convertir en una aventura agradable, pues no solo garantiza la compresión de los conceptos, sino que logra motivar a los estudiantes en la profundización de estos conceptos y con ello aportar a que se realce la importancia de la química en la comprensión del mundo.

Referencias

Chum Wu, Ch. & Jordan Foos. (2010) *Making Chemistry Fun to learn*. *Lit. Inf. Comput. Educ. J.* 1(1): 3–7. doi: 10.20533/licej.2040.2589.2010.0001

Chemistry Cartoons … for Chemists. (12-Dic-2023). https://cen.acs.org/sections/sketch-chemistry.html

Gonick, L. & Criddle, G. (2005). *The Cartoon Guide to Chemistry*. Harper Resources Eds.

Química Plegada. (7-Jul-2021). https://puntoaparte.com.co/proyecto/quimica-plegada/

Sketch Chemistry (12-Dic-2023). https://www.chemscrapes.net

Proposición De La Disciplina De Química Con Relación Al Plan De Estudios De La Educación Básica En Países Sudamericanos Vinculados A La UNESCO

Proposition Of The Chemistry Subject Regard To Basic Education Curriculum In South American Countries Associated To UNESCO

Santos, E. F.[1], Cedran, J. C.[2], Pires, E. L.[1]
[1]Departamento de Química, Universidad Tecnológica Federal do Paraná, Medianeira, Brasil.
[2]Departamento de Química Universidad Estadual de Maringá, Maringá, Brasil

elpires@utfpr.edu.br

Área Temática: Enseñanza de Química.
Palabras clave: Educación básica, plan de estudios, sudamericano.

La educación básica es un pilar para cualquier nación, ya que una base consolidada es fundamental para crear ciudadanos capaces de hacer una sociedad más tolerante, justa y inclusiva. En este sentido, el trabajo pretende presentar cómo se encuentra estructurada la educación básica en diferentes países sudamericanos vinculados a la UNESCO, específicamente mientras están en la escuela, ya que en este periodo los estudiantes entran en contacto con la asignatura de química de manera obligatoria o electiva.

Para la elaboración fueron consultados documentos, teniendo como base la Clasificación Internacional Normalizada de la Educación, CINE, de la UNESCO (UNESCO, 2024), que regula la educación básica en cada uno de los países de América del Sur, estes son: Argentina (provincia de Buenos Aires), Bolivia, Chile, Colombia, Ecuador, Paraguay, Perú, Uruguay y Venezuela. Nos enfocamos en la clasificación, carga horaria y obligatoriedad de las asignaturas que tienen como objetivo desarrollar conceptos químicos en el nivel secundario, abarcando el grupo de edad de 12 a 17 años (teniendo pequeñas variaciones según cada país).

En países como Argentina, Brasil, Bolivia, Ecuador, Paraguay, Uruguay y Venezuela la química es obligatoria en algún periodo de la escuela. Entre estos, en Brasil, Paraguay y Uruguay también existe la posibilidad de que los alumnos estudien Química en cursos optativos. En Chile, la Química se trata de nada más que una materia optativa. Por otro lado, en Colombia existen algunas materias obligatorias (entre ellas “Ciencias Naturales”) pero sin carga horaria definida. La institución educativa tiene la autonomía para establecer la carga horaria en su proyecto.

La asignatura de Química, en la gran mayoría de los países estudiados, presenta el mismo perfil de contenidos y “asignación” en sus planes de estudios; con pequeñas variaciones entre ellos. La carga de trabajo, en general, es de valor similar en comparación con la empleada en otras áreas.

Referencias

UNESCO. (2024). *SITEAL*. Fonte: Sistema de Información de Tendencias Educativas en América Latina: https://siteal.iiep.unesco.org/

Evaluación Del Poder Antioxidante De Extractos Bioactivos Obtenidos De La Hoja De *Coffea arabica* L. Desafío Para El Desarrollo De Habilidades Investigativas.

Evaluation O The Antioxidant Power Of Bioactive Extracts Obtained From The Leaf Of *Coffea arabica* L. Challenge For The Development Of Research Skills.

Laura Ximena Murcia Sánchez[1], Rodrigo Rodríguez Cepeda[2]
[1]Semillero de investigación-capitulo internacional de estudiantes ACS-UPN chiemeia, Universidad Pedagógica Nacional, Bogotá, Colombia.
[2]Grupo de investigación Didáctica y sus ciencias, Universidad pedagógica Nacional, Bogotá, Colombia. Profesor

laxmurcias@upn.edu.co

Área temática: Enseñanza de la Química.
Palabras claves: *Coffea arabica* L, habilidades investigativas, antioxidante, revisión bibliográfica.

Las ciencias básicas, y entre ellas la química, requiere de personas con algunas características especiales entre las que se encuentran: contar con un pensamiento crítico, capacidad de análisis y capacidad de observación entre otras cualidades que se recopilan en las habilidades investigativas, por lo que muchos investigadores han trabajado diferentes propuestas para desarrollarlas y fomentarlas durante el proceso de formación profesional. En este contexto, la presente propuesta pretende diseñar una estrategia didáctica enfocada al desarrollo y fortalecimiento de las habilidades investigativas en estudiantes de química y programas académicos afines en el contexto de los extractos bioactivos de fuentes naturales poco comercializables y sus posibles usos, un ejemplo de ello, son los posibles compuestos bioactivos extraídos de las hojas de café (*Coffea arabic*a L).

Para este fin, se adopta una metodología de revisión bibliográfica argumentativa-exploratoria, la cual permite establecer si existen trabajos previos donde se incluyan como variables de investigación el desarrollo de habilidades investigativas en el contexto de los extractos bioactivos y sus usos prácticos, en el área de la química o la bioquímica. Igualmente, esta revisión bibliográfica establece criterios para asegurar si el contexto de los extractos bioactivos es el más adecuado para el desarrollo de las habilidades y por tanto una vía para proponer estrategias didácticas a aplicar en el aula.

Como resultado, se evidencia que en un periodo de tiempo no superior a diez años no existe suficiente información, en revistas indexadas, sobre identificación fitoquímica y procesos de extracción de compuestos bioactivos en hojas de Coffea arabica L. Y su uso en estrategias didácticas encaminadas al desarrollo de habilidades investigativas en los procesos de enseñanza de la química.

En este sentido, se propone una estrategia didáctica que articule la extracción de compuestos bioactivos presentes en la hoja de Coffea arabica L, sus posibles usos en el tratamiento de enfermedades neuro degenerativas y el desarrollo de habilidades investigativas en estudiantes de la carrera de Licenciatura en química y afines.

Referencias

Chen, X. (2019). A review on coffee leaves: Phytochemicals, bioactivities and applications. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition, 59*(6), 1008–1025. doi:https://doi.org/10.1080/10408398.2018.1546667

Villareal-Rosales, M., Rocha, N., Gallegos Infante, J., Moreno Jimenez, M., Reynoso Camacho, R., Perez Ramirez, I., & Gonzalez, L. (2021). Antioxidant phytochemicals and modulation of oxidative stress from infusions and ultrasound-assisted extractions of Coffea leaves. *Revista Chapingo Serie Ciencias Forestales Y Del Ambiente, 28*(1), 119-137. doi:https://doi.org/10.5154/r.rchscfa.2021.05.026

Influencia de la metodología ABP sobre la argumentación de los juicios metacognitivos en ciencias de docentes en formación del programa de Licenciatura en Ciencias Naturales de la Universidad de Caldas

Influence of the ABP methodology on the argumentation of metacognitive judgments in science for teachers in training in the Bachelor of Natural Sciences program at the University of Caldas

Salgado-Patiño,M[1]**,Rodas-Rodríguez,J**[2,3]**,Ruíz-Ortega,F**[4,5]

[1]Semillero de investigación reflexiones en didáctica de las ciencias (REDIC), Universidad de Caldas, Manizales, Colombia
[2]Grupo de Investigación Química Teórica y Bioinformática (QTB), Universidad de Caldas, Manizales, Colombia.
[3]Departamento de química, Universidad de Caldas, Manizales, Colombia
[4]Grupo de Investigación Cognición y Educación, Universidad de Caldas, Manizales, Colombia.
[5]Departamento de estudios educativos, Universidad de Caldas, Manizales, Colombia

maria.3972012555@ucaldas.edu.co

Área Temática: Enseñanza de la Química.
Palabras clave: Aprendizaje basado en proyectos, Tipos de argumentos, Formación de Docentes, Química inorgánica, Argumentación en ciencias.

Este estudio se enfocó en intervenir en la argumentación de los estudiantes de Ciencias Naturales en química inorgánica mediante un proyecto basado en problemas reales. Se llevaron a cabo actividades y evaluaciones metacognitivas, que permitieron diagnosticar y clasificar los argumentos según la tipología de Van Eemeren. A pesar de hacer uso de todos los tipos de argumentos, predominaron los simples, señalando la necesidad de mejorar estas habilidades.

Se realizó una investigación cualitativa para evaluar la competencia argumentativa de los docentes en formación usando la metodología de "aprendizaje basado en proyectos" (ABP). Se utilizó la tipología de argumentos de Van Eemeren para caracterizar y clasificar los argumentos en simples, coordinados, subordinados y múltiples. Estos argumentos se identificaron en las secciones de justificación y planteamiento del problema de los proyectos. Además, se evaluaron los juicios metacognitivos, valorando el cumplimiento de varias afirmaciones utilizando una escala de Likert.

Durante la fase inicial de los proyectos, los argumentos simples fueron los más frecuentes, seguidos por los subordinados y coordinados. Los juicios metacognitivos iniciales tuvieron una valoración promedio de 3. Después de la intervención, aunque los argumentos simples siguieron siendo los más comunes, se observó un aumento en la frecuencia de los argumentos subordinados y coordinados. En los juicios metacognitivos finales, la valoración promedio de 3 se mantuvo, pero se incrementó la frecuencia de la valoración 4.

La intervención realizada resultó en una mejora notable en la calidad de los argumentos de los docentes en formación, con un aumento en la frecuencia de argumentos subordinados y coordinados, que son más estructurados que los simples. Los argumentos múltiples, que son los más complejos y sólidos, siguen siendo los menos utilizados, lo que indica la necesidad de continuar las intervenciones para fomentar su uso. A pesar de ello, la persistencia en la baja frecuencia de los argumentos múltiples sugiere que es necesario seguir interviniendo en la capacidad argumentativa de los docentes en formación.

Referencias

Sánchez, J. (2013). *colorearte.cl*. Obtenido de https://colorearte.cl/wp-content/uploads/2021/05/Aprendizaje-basado-en-proyectos.pdf

Van Eemeren, F. H., & Snoeck, A. F. (2017). *Argumentation: analysis and evaluation*. New York: Routledge.

Caracterización de psilocibina por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas

Use of gas chromatography coupled to mass spectrometry for characterization of psilocybin

Ruíz Jiménez Jorge Galileo.[1,2], Miranda Quintero Samuel.[1,2], Cabrera Hernández Julio Cesar.[1,2]

[1]Grupo de investigadores en Química Forense de Drogas Incautadas, fiscalía general del Estado de Michoacán, México.

[2]Coordinación General de Servicios Periciales de la fiscalía general del estado de Michoacán, México.

jgalileoruiz@gmail.com

Área Temática: Química Forense y Toxicología.

Palabras clave: Microdosis, psilocibina, hongos alucinógenos, nuevas sustancias psicotrópicas, cromatografía.

El aumento vertiginoso en la comercialización y distribución de productos elaborados con fragmentos de hongos alucinógenos del género *Psilocibe* y otras estructuras vegetales para consumo como drogas de abuso, rituales y como tratamiento alternativo para reducir el estrés, ansiedad y otras aflicciones mentales, representa un desafío en su identificación química debido a las micro concentraciones en las que se encuentran. La Psilocibina se encuentra regulada en México como psicotrópico y también es considerada dentro de la clasificación de nuevas sustancias psicoactivas.

Para el desarrollo de este estudio investigativo, se utilizaron indicios recibidos propios del proceso de incautación de drogas, mediante extracción por el método de maceración a temperatura ambiente, con metanol durante un período de 10 días. En donde los extractos fueron analizados en columna preparativa con gel de sílice 60, permitiendo la obtención de fracciones con compuestos indólicos a través de la cromatografía de capa fina y su posterior identificación por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas.

De la separación cromatográfica en columna preparativa empleando gel de sílice 60 fase directa, se obtuvieron 60 fracciones de las cuales cada una se analizó por cromatografía en capa fina y se revelo con el reactivo Van Urk. Las fracciones que generaron un color violeta para las estructuras base de indol se juntaron y se recromatografiaron para obtener su purificación. La caracterización de la Psilocina se realizó por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas.

Las incautaciones de productos que contienen psilocibina un potente psicoactivo que biosintetizan los hongos mágicos del género *Psilocibe* va en aumento. Sustancia que se encuentra relacionada en la comisión de delitos contra la salud en México, donde la separación y purificación de productos naturales, juegan un papel neurálgico en la elucidación estructural de la Psilocibina que se encuentra regulada por la Ley General de Salud.

Referencias

Wanhui Liu (2021) Sensitive quantitative of psilocybin in hair samples from suspected users and their distribution in seized hallucinogenic mushrooms. *Forensic Toxicology*.

Catia S.M. Esteves (2022) Combining FTIR-ATR and OPLS-DA methods for magic mushrooms discrimination. *Forensic Chemistry. Vol. 29.*

Estudio Preliminar de Bisfenol A en botellas plásticas reutilizables en Panamá mediante LC-MS/MS no dirigido

Preliminary Study of Bisphenol A in Reusable Plastic Bottles in Panama using Non-targeted LC-MS/MS

Barría-Almengor, F.[1, 2, 3, 4], Vela-Soria, F.[5], Jaén, J.[1,3,6], Castillero-Rosales, I.[1,2,3,7], Olea, N.[8]

[1]Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología de la Universidad de Panamá, Ciudad de Panamá, Panamá.
[2]Centro de Información e Investigación de Medicamentos y Tóxicos, Vicerrectoría de Investigación y Postgrado de la Universidad de Panamá, Ciudad de Panamá, Panamá.
[3]Grupo de Investigación, Innovación y Desarrollo en Química Aplicada, Vicerrectoría de Investigación y Postgrado de la Universidad de Panamá, Ciudad de Panamá, Panamá.
[4]Programa de Maestría en Toxicología, Vicerrectoría de Investigación y Postgrado de la Universidad de Panamá, Ciudad de Panamá, Panamá.
[5]Instituto de Investigación Biosanitaria de Granada (ibs. GRANADA), E-18012, Granada, España.
[6]Sistema Nacional de Investigación, secretaría nacional de Ciencia y Tecnología, Ciudad de Panamá, Panamá.
[7]Programa de Doctorado en Medicina Clínica y Salud Pública, Facultad de Medicina, Universidad de Granada, España.
[8]Departamento de Radiología y Medicina Física, Universidad de Granada, E- 18016, Granada, España.

felipe.barria@up.ac.pa

Área Temática: Química Forense y Toxicología.
Palabras clave: Bisfenol A, LC-MS/MS, DLLME, Estrogénico, Disruptor endocrino.

El Bisfenol A es el monómero del Policarbonato, esencial para fabricar botellas plásticas reutilizables destinadas al envasado de agua. Considerando su naturaleza estrogénica y capacidad para migrar a los alimentos se evaluó su presencia en los envases de venta regular en la Ciudad de Panamá.

Se evaluaron 4 sistemas de extracción para el Bisfenol A mediante migración acelerada por agitación durante 48 horas para cada componente de la botella (siliconas, recipiente, cánula, etc.). Los extractos fueron concentrados para extraer el bisfenol A utilizando Microextracción Dispersiva Líquido – Líquido (DLLME). La identificación y cuantificación de Bisfenol A se realizó mediante cromatografía liquida de ultra alta resolución con espectrometría de masas en tándem (QTRAP LC-MS/MS). El LOD alcanzado fue de 0.2 ppb.

Los sistemas de extracción ensayados fueron: DCM/ACN, ACN, ACN/AGUA, AGUA para cada componente de las botellas, registrando hasta ocho componentes por recipiente que fueron sometidos a extracción individual para evaluar su posible contribución como fuente de Bisfenol A. Se logró cuantificar Bisfenol A en 100 % (n=10) de las muestras de botellas reutilizables ensayadas.

Los niveles de Bisfenol A variaron en función del sistema de extracción, registrándose que el mejor sistema fue el de ACN con un promedio de extracción de 38.033 ng / g botella; sin embargo, es importante señalar que el 60% (n=6) de las botellas analizadas liberaron Bisfenol A en el solvente AGUA. La concentración promedio más baja de bisfenol A fue de 27.1 ng/g botella y la concentración máxima fue de 57.8 ng/g botella. Se estima que estos valores son las concentraciones de Bisfenol que liberarían a lo largo de su periodo de vida útil.

Este diseño experimental se realiza por primera vez en la Universidad de Panamá gracias a la alianza estratégica con la Universidad de Granada, España. Comprobando que en el mercado panameño existen botellas reutilizables de venta libre que podrían liberar un disruptor endocrino como Bisfenol A al agua de consumo. Es evidente la necesidad de implementar regulaciones que ayuden a prevenir enfermedades crónicas no transmisibles (Diabetes, obesidad, entre otras) asociadas a este compuesto.

Referencia

Bian, L., Li, S., Ge, X., Wang, M., Li, K., & Wang, X. (2023). Determination of bisphenols, triclosan, and parabens in bottled water by solid-phase microextraction combined with gas chromatography-tandem mass spectrometry and assessment of the associated health risk. *Journal of Food Composition and Analysis*, *123*, 105548. https://doi.org/10.1016/J.JFCA.2023.105548

Wang, H., Liu, Z. hua, Tang, Z., Zhang, J., Yin, H., Dang, Z., Wu, P. xiao, & Liu, Y. (2020). Bisphenol analogues in Chinese bottled water: Quantification and potential risk analysis. *Science of the Total Environment*, *713*. https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.136583

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Perfil Químico de Metales Pesados en Alimentos de Consumo Frecuente en la ciudad de Panamá: un Estudio Piloto

Chemical Profile of Heavy Metals in Frequently Consumed Foods in Panama City: a pilot study

Rosa Zambrano[1], Patricia Jaar[1], Barría-Almengor, F.[2], Castillero-Rosales, I.[2]

[1]Laboratorio Food Safety, Panamá

[2]Universidad de Panamá, Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Panamá.

rzambrano@foodsafetypanama.com

Área Temática: Química Forense y Toxicología.

Palabras clave: Alimento, Ingesta Diaria, Metales Pesados, One Health, Salud.

Los metales pesados se encuentran ubicuos en el medio ambiente, en los alimentos contaminados, agua, polvo y aire. La exposición a estos metales predispone al ser humano y a su descendencia al desarrollo de enfermedades crónicas degenerativas como Alzheimer, diferentes tipos de cáncer, osteoporosis, entre otros. El estilo de vida y particularmente la dieta juegan un rol crucial en la exposición individual a contaminantes químicos medioambientales.

La organización mundial de la Salud (OMS) y la agencia de registro de sustancias toxicas y enfermedades (ASTDR) reconocen que el arsénico, el plomo y el mercurio son los elementos más tóxicos que amenazan la salud humana.

El objetivo de este trabajo fue la determinación de cinco metales de interés toxicológico (Cr, Cd, Pb, Hg y As) en cuatro grupos de alimentos de consumo frecuente en Panamá que corresponden a granos (arroz, maíz), proteína de origen animal (carne de res, pescado), grasas saludables (aguacate) y azúcares (Sacarosa). Se seleccionaron tres submuestras de cada alimento elegido las cuales fueron adquiridas, al azar, en los mercados locales de la ciudad de Panamá. Las muestras fueron procesadas por triplicado mediante digestión asistida por microondas y la cuantificación se realizó de acuerdo con su naturaleza química, mediante Absorción Atómica con: horno de grafito (Cr, Cd, Pb), generación de hidruros (As) y generación de vapor frío (Hg).

Los resultados muestran niveles cuantificables de Cromo (0.1-1.3 ug/kg) y Plomo (0.2-0.3 ug/kg) en el 100 % (n =18) de las muestras ensayadas independientemente del tipo de grupo alimenticio al que pertenecen. Las muestras de proteína de origen animal (Carne de res y pescado) presentan además niveles cuantificables de Mercurio (0.31-0.33 ug/kg). El 34 % de las muestras presentaron niveles cuantificables de Arsénico (0.2 ug/kg) y de Cadmio (0.4 ug/kg). Estos resultados evidencian la ingesta de metales pesados asociados a problemas de salud humana, en alimentos de consumo frecuente en Panamá.

Referencias

Castaño, A., Pedraza-Díaz, S., Cañas, A. I., Pérez-Gómez, B., Ramos, J. J., Bartolomé, M., Pärt, P., Soto, E. P., Motas, M., Navarro, C., Calvo, E., & Esteban, M. (2019). Mercury levels in blood, urine and hair in a nation-wide sample of Spanish adults. *Science of the Total Environment*, *670*, 262–270. https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.03.174

Chen, R., Hu, M., Cheng, N., Shi, R., Ma, T., Wang, W., & Huang, W. (2024). Prediction of the bioaccessibility and accumulation of cadmium in the soil-rice-human system based on optimized DGT and BCR coupled models. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, *280*. https://doi.org/10.1016/j.ecoenv.2024.116509

Dow, C., Kadawathagedara, M., Ghozal, M., Charles, M.-A., Adel-Patient, K., Dereumeaux, C., & de Lauzon-Guillain, B. (2024). Maternal diet quality during pregnancy and biomarkers of potentially toxic trace element exposure: Data from the ELFE cohort. *Food and Chemical Toxicology*, *190*, 114793. https://doi.org/10.1016/j.fct.2024.114793

INCAP. (2006). *INSTITUTO DE NUTRICIÓN DE CENTRO AMÉRICA Y PANAMÁ (INCAP) ORGANIZACIÓN PANAMERICANA DE LA SALUD (OPS)*. http://www.incap.int

Liu, P., Wang, J., Mei, P., Li, J., Xu, B., Ren, X., Chen, X., Wu, D., Zhu, F., Yang, X., He, M., Liu, J., & Huang, H. (2024). The interaction effect of metals exposure and dietary habit on cognitive function in Chinese older adult cohort. *Journal of Nutrition, Health and Aging*, *28*(7). https://doi.org/10.1016/j.jnha.2024.100284

World Health Organization. (2010). Ten chemicals of major public health concern. *World Health Organization*, 1-4.

Estudio Piloto de la Exposición perinatal al DDE a través de leche materna en la cohorte materno-infantil: PA-MAMI

Pilot Study of Perinatal Exposure to DDE through breast milk in the maternal-infant cohort: PA-MAMI

Castillero-Rosales, I.[1,2], Alvarado González NE[3], Suárez B[4]., Barría-Almengor, F.[1,2], Olea N[5,6,7,8], Iribarne-Durán LM[5]

[1]Universidad de Panamá, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología Departamento de Química Analítica, Panamá.

[2]Universidad de Panamá, Vicerrectoría de Investigación y Postgrado, Centro de Información e Investigación en Medicamentos y Tóxicos, Panamá.

[3]Instituto Especializado de Análisis, Vicerrectoría de Investigación y Postgrado, Universidad de Panamá, Panamá.

[4]Departamento de Química Analítica, Universidad de Granada, España

[5] Instituto de Investigación Biosanitaria de Granada (ibs.GRANADA), Granada, España

[6] CIBER de Epidemiología y Salud Pública (CIBERESP), Madrid, España

[7]Departamento de Radiología y Medicina Física. Universidad de Granada, Granada. España

[8]Unidad de Medicina Nuclear. Hospital Universitario San Cecilio. Granada, España

irene.castillero@up.ac.pa

Área Temática: Química Forense y Toxicología.

Palabras clave: DDE, Exposición, Disruptor Endocrino, Leche Materna, Perinatal.

El DDE es un metabolito del DDT, un plaguicida ampliamente utilizado hasta su prohibición en el año 2000 por su carcinogenicidad. El DDE puede encontrarse bioacumulado en las reservas de grasa del cuerpo humano y durante la lactancia, la movilización de estas reservas grasas para la producción de calostro y leche materna puede conllevar a la excreción de este metabolito con la consecuente exposición perinatal del recién nacido.

El objetivo de este estudio piloto fue evaluar los niveles de DDE en muestras de calostro de la cohorte materno infantil: PA-MAMI y estimar la exposición perinatal a este compuesto.

Se analizaron muestras de calostro de doce mujeres de la cohorte materno-infantil PA-MAMI (aprobación de bioética: CBIUP 2016-MV-01-003) mediante micro extracción dispersiva líquido-líquido (DLLME) (Vela-Soria et al., 2016) y Cromatografía de Gases MS/MS. El límite de detección (LOD) fue de 0.5 ng/mL y el límite de cuantificación (LOQ) fue de 1.3 ng/mL.

Se determinó la presencia de DDE en más del 80% de las muestras analizadas con niveles entre 1.4 - 26 ng/mL de DDE, lo que implica una ingesta promedio entre 28 y 520 ng/kg/día de DDE, superando en algunos casos (33%) el valor provisional de toxicidad oral para el DDE de 300 ng/kg/día.

La exposición crónica al DDT y sus metabolitos se ha asociado a desarrollo de enfermedades crónicas no transmisibles como la diabetes y la obesidad, lo que pone de manifiesto la necesidad de biomonitorizar niveles de contaminantes químicos en la población panameña de manera que se logre implementar políticas de protección a la salud de grupos vulnerables como lo son las mujeres en edad fértil y los niños.

Referencias

Atsdr. (n.d.). *Toxicological Profile for DDT, DDE, and DDD*.

Bates, M. N., Hannah, D. J., Buckland, S. J., Taucher, J. A., & Van Maanen3, T. (n.d.). Chlorinated Organic Contaminants in Breast Milk of New Zealand Women. In *Environmental Health Perspectives Supplements* (Vol. 102).

Chávez-Almazán, L. A., Saldarriaga-Noreña, H. A., Díaz-González, L., Garibo-Ruiz, D., & Waliszewski, S. M. (2020). Dietary habits associated with the presence of organochlorine pesticides in human milk. *Journal of Environmental Science and Health - Part B Pesticides, Food Contaminants, and Agricultural Wastes*, 756–766. https://doi.org/10.1080/03601234.2020.1783169

IARC Monographs evaluate DDT, lindane, and 2,4-D. (2015). http://www.iarc.fr/en/media-centre/iarcnews/pdf/Monographs-Q&A.pdf

Iribarne-Durán, L. M., Castillero-Rosales, I., Peinado, F. M., Artacho-Cordón, F., Molina-Molina, J. M., Medianero, E., Nicolás-Delgado, S. I., Sánchez-Pinzón, L., Núñez-Samudio, V., Vela-Soria, F., Olea, N., & Alvarado-González, N. E. (2024). Placental concentrations of xenoestrogenic organochlorine pesticides and polychlorinated biphenyls and assessment of their xenoestrogenicity in the PA-MAMI mother-child cohort. *Environmental Research*, *241*. https://doi.org/10.1016/j.envres.2023.117622

Jiménez-Díaz, I., Vela-Soria, F., Rodríguez-Gómez, R., Zafra-Gómez, A., Ballesteros, O., & Navalón, A. (2015). Analytical methods for the assessment of endocrine disrupting chemical exposure during human fetal and lactation stages: A review. In *Analytica Chimica Acta* (Vol. 892, pp. 27–48). Elsevier B.V. https://doi.org/10.1016/j.aca.2015.08.008

Vela-Soria, F., Jiménez-Díaz, I., Díaz, C., Pérez, J., Iribarne-Durán, L. M., Serrano-López, L., Arrebola, J. P., Fernández, M. F., & Olea, N. (2016). Determination of endocrine-disrupting chemicals in human milk by dispersive liquid-liquid microextraction. *Bioanalysis*, *8*(17), 1777–1791. https://doi.org/10.4155/bio-2016-0073

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Estudio de las propiedades catalíticas de nanopartículas de óxido de cerio dopado con gadolinio en la reacción de transesterificación del aceite de girasol para la obtención de biodiésel

Study of the catalytic properties of gadolinium-doped cerium oxide nanoparticles in the transesterification reaction of sunflower oil to obtain biodiesel

Valladares, S.[1,2], Chandi, J.[1,2], Cabrera, E.[1,2], Parra, Y.[1,3], Leal, M.[1,4], Herrera, N.[1,5], Lamas, D.[6]

[1]Grupo de Investigación en Moléculas y Materiales Funcionales (MoléMater), Quito, Ecuador.
[2]Facultad de Ingeniería Química, Universidad Central del Ecuador, Quito, Ecuador.
[3]Facultad de Ingeniería Ambiental, Universidad Central del Ecuador, Quito, Ecuador.
[4]Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Central del Ecuador, Quito, Ecuador.
[5]Escuela Politécnica Nacional, Quito, Ecuador.
[6]Universidad Nacional de San Martín, Buenos Aires, Argentina.

sivalladaresl@uce.edu.ec

Área temática: Química de Materiales.
Palabras clave: nanopartículas, transesterificación, biodiésel, catálisis heterogénea.

El estudio se enfoca en las propiedades catalíticas de nanopartículas de óxido de cerio dopado con gadolinio (GDC) en la transesterificación del aceite de girasol para la obtención de biodiésel. El objetivo es contribuir al desarrollo de catalizadores más eficientes y sostenibles para la producción de biocombustible a partir de fuentes renovables como el aceite de girasol. El catalizador fue sintetizado mediante el método de co-precipitación en medio acuoso, a partir de $Ce(NO_3)_3{\cdot}6H_2O$, $Gd(NO_3)_3{\cdot}6H_2O$ como precursores y NaOH como aglomerante, el nanomaterial fue secado (24 h, 40 °C) y después calcinado (800 °C, 2 h). La transesterificación se realizó en un sistema batch a una temperatura controlada de 80 °C con una relación molar de 8:1 (metanol: aceite) durante 9 h de reacción a 900 rpm con una cantidad de GDC del 1,5 % en peso del aceite. El GDC fue caracterizado mediante DRX, análisis BET y TGA en donde se determinó que su celda unitaria es cúbica ($\alpha = \beta = \gamma = 90°$) y el tamaño de cristalito es de 13,36 nm, confirmando la formación de un nanocatalizador, así como, el área superficial que fue de 24,73 m^2/g y las curvas de TGA revelan la efectividad de la recuperación del catalizador. El biodiésel fue caracterizado mediante TLC, GC-MS y FTIR, comprobando la formación de FAMEs (*Fatty acids methyl ester*) y el cumplimiento de la normativa ecuatoriana NTE-INEN 2482:2009. Se obtuvo una selectividad de FAMEs del 79,52 % y un rendimiento de reacción del 71,35 %. Sin embargo, en los resultados del DRX se visualiza una formación anormal antes del primer pico característico, por lo cual se recomienda realizar un estudio de la temperatura de secado. Con los resultados se comprueba que las nanopartículas sintetizadas de GDC funcionan correctamente como catalizador heterogéneo para la transesterificación del aceite de girasol con alta selectividad hacia los FAMEs y tiene potencial para ser reutilizado.

Referencias

Dhanasekar, K., Sridaran, M., Arivanandhan, M., & Jayavel, R. (2019). A facile preparation, performance and emission analysis of pongamia oil based novel biodiesel in diesel engine with CeO_2:Gd nanoparticles. The Science and Technology of Fuel and Energy, 1-7. https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.115756

Hasakul, T., Piticharoenphun, S., Rattanaphra, D., & Nuchdang, S. (2022). A study of the precipitation of cerium oxide synthesized from rare earth sources used as the catalyst for biodiesel production. Berlín: Gruyter: Green Processing and Synthesis. https://doi.org/10.1515/gps-2022-0069

Interacciones iónicas en gelificante de bajo peso molecular basado en L-Valina y ácido succínico

Ionic interactions in a low molecular weight gelator based on L-Valine and succinic acid

Guarnizo Franco, A.[1], Lozano Ipus, J. E.[1]

[1]Grupo de investigación en Materiales Activos (G+), Universidad del Tolima, Departamento de Química, Ibagué, Tolima, Colombia.

aguarnizof@ut.edu.co

Área temática: Química de Materiales.

Palabras clave: Nanotransportador, iones metálicos, nanomaterial, gelador, fármacos.

Los gelificantes de bajo peso molecular (GBPM) son una clase de materiales blandos que han llamado la atención recientemente para ser aplicados en liberación controlada de fármacos. Estos forman geles mediante el autoensamblaje de pequeñas moléculas para formar una red interconectada capaz de retener un solvente y al mismo tiempo una sustancia bioactiva. Los agregados que forman van desde nanoestructuras hasta macroestructuras como los geles supramoleculares. La formación y ruptura de los geles ya sean nanoestructurados o macroestructurados, se puede controlar con estímulos externos como la temperatura y el pH.

En este estudio se emplearon diferentes iones inorgánicos para controlar la agregación de un GBPM derivado del succinato, valina y dodecilato (SucValDoc). Su capacidad de producir agregados supramoleculares se analizó a través de turbidimetría, desplazamiento de la línea base en su espectro ultravioleta y visible UV/Vis y dispersión dinámica de luz (DLS).

Se encontró que el SucValDoc se estabiliza de manera similar al de las proteínas según la serie de Hofmeister: los cationes polivalentes tienden a formar agregados más grandes y por la tanto más estables, al igual que los aniones más voluminosos. Se espera que con estos resultados sirvan como base para el desarrolla de un nuevo sistema de liberación controlada de fármacos basado en la interacción del SucValDoc con iones inorgánicos.

Referencias

Feng, X., Luo, Y., Li, F., Jian, X., & Liu, Y. (2021). Development of Natural-Drugs-Based Low-Molecular-Weight Supramolecular Gels. Gels, 7(3). https://doi.org/10.3390/GELS7030105

Sastri, T. K., Gupta, V. N., Chakraborty, S., Madhusudhan, S., Kumar, H., Chand, P., Jain, V., Veeranna, B., & Gowda, D. V. (2022). Novel Gels: An Emerging Approach for Delivering of Therapeutic Molecules and Recent Trends. Gels, 8(5). https://doi.org/10.3390/GELS8050316

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Evaluación comparativa de la remoción de fosfatos en matrices simuladas y reales con cascarilla de arroz transformada química y térmicamente

Comparative evaluation of the removal of phosphates in simulated and real matrices with chemically and thermally transformed rice husk

Rodríguez-Herrera, L.F[1], Barrera, J.[1], Jaramillo-Paez, C.[1],

[1]Grupo de Investigación en Química Aplicada a Procesos Ecológicos, Universidad del Tolima, Ibagué, Colombia.

lfrodriguezh@ut.edu.co

Área Temática: Química de Materiales.

Palabras claves: Cascarilla de arroz, fosfatos, aguas residuales, hidróxido doble laminar, Remoción.

Una de las fuentes de contaminación hídrica más común a nivel global son las descargas de aguas residuales, las cuales contienen una gran variedad de contaminantes de diferente naturaleza, entre los que se encuentran los fosfatos, el exceso de estos conlleva a la eutrofización de las fuentes hídricas, una problemática ambiental que se evidencia a nivel mundial.

Ante tal problemática, se ha buscado alternativas eficientes para la remoción de fosfatos de las fuentes hídricas, una de estas es la adsorción con residuos lignocelulósicos como la cascarilla de arroz, el cual es visto como un desecho que puede ser ambientalmente perjudicial si no tiene un correcto tratamiento, por lo que su transformación por métodos químicos o físicos a material adsorbente da una alternativa eficaz desde el punto de vista de la economía circular.

La cascarilla de arroz fue tratada químicamente con Nitrato de Magnesio Hexahidratado ($MgNO_3 \cdot 6H_2O$), Nitrato de Aluminio Nonahidratado ($AlNO_3 \cdot 9H_2O$) e Hidróxido de Sodio (NaOH). Por otro lado, se trató térmicamente a 300, 500 y 700°C con el fin de mejorar sus propiedades adsorbentes.

Estos materiales fueron caracterizados por diferentes técnicas analíticas, para determinar sus propiedades estructurales. Se realizaron ensayos de adsorción de PO_4^{3-} sobre los diferentes materiales y se evalúo la cinética de adsorción por los modelos de Langmuir y Freundlich; además se determinó la capacidad de adsorción de los materiales evaluando pH, temperatura, concentración de fosfatos, y tiempo de tratamiento.

Los ensayos de adsorción para PO_4^{3-} demuestran que la cascarilla modificada con hidróxidos dobles laminares (RH-LDH) y la cascarilla con hidróxidos dobles laminares y tratamiento térmico (RH-LDH-HT), presentan porcentajes de remoción del 93.64% y 93.77% respectivamente a pH 3.3 utilizando 0.25 g de material. Se determinaron las isotermas de adsorción para conocer el comportamiento del proceso y se encuentra que la adsorción sobre el material RH-LDH sigue el modelo de la isoterma de Langmuir con procesos de quimisorción y para el material RH-LDH-HT se sigue el modelo de adsorción de Freundlich con proceso de fisisorción, En conclusión, los materiales obtenidos son eficientes para la adsorción de fosfatos presentes en el agua, proporcionando una alternativa de remoción ambientalmente amigable.

Referencias

Lee, S. Y., Choi, J. W., Song, K. G., Choi, K., Lee, Y. J., & Jung, K. W. (2019). Adsorption and mechanistic study for phosphate removal by rice husk-derived biochar functionalized with Mg/Al-calcined layered double hydroxides via co-pyrolysis. Composites Part B: Engineering, 176, 107209. https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2019.107209

Lim, S., Lee, H. S., & Kawashima, S. (2018). Pore structure refinement of cement paste incorporating nanosilica: Study with dual beam scanning electron microscopy/focused ion beam (SEM/FIB). Materials Characterization, 145, 323–328. https://doi.org/10.1016/j.matchar.2018.08.045

Formación de enlaces covalentes dinámicos de ácidos borónicos en la interfaz polímero-nanopartículas para la obtención de hidrogeles nanocompuestos inyectables

Dynamic covalent bond formation of boronic acids at the polymer-nanoparticle interface for the creation of injectable nanocomposite hydrogels

Ruiz, C.[a], Sánchez, J.[a], Oyarzun Y.[a], Boury, B.[b], Ulloa J.[a], and Urbano B.[a]

[a]Departamento de Polímeros, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Concepción, Concepción, Chile

[b]ICGM, CNRS, Univ. Montpellier, ENSCM, Montpellier, 34293 Montpellier,

julloa@udec.cl

Área Temática: Química de Materiales.

Palabras claves: hidrogeles, nanocompositos, ácidos borónicos, reometría, polímeros.

Los hidrogeles nanocompuestos inyectables son de gran interés para aplicaciones médicas. Sin embargo, los hidrogeles nanocompuestos tradicionales basados en la reticulación covalente a menudo son vítreos y mecánicamente débiles, lo que limita sus aplicaciones biomédicas. Además, los materiales de carga con módulos dramáticamente diferentes en relación con la matriz actúan como concentradores de estrés, lo que lleva a que la región interfacial entre las nanopartículas y el polímero se convierta en el principal lugar de fallo del compuesto. Un enfoque interesante es la incorporación de enlaces covalentes dinámicos en la red, proporcionando propiedades de auto reparación y disipación de energía mecánica para obtener materiales mecánicos más estables. Introducimos la química covalente dinámica de los ácidos borónicos en la interfaz para superar la concentración de esfuerzos en la región nanopartícula-polímero. Los hidrogeles nanocompuestos están formados por nanopartículas de SiO_2 funcionalizadas con ácidos borónicos (SiO_2-BA) combinadas con alginato de sodio modificado con ácido borónico (AlgBA). Las nanopartículas primero se funcionalizaron con grupos amino. Luego, el ácido borónico fenil-2-formilo se inmovilizó en la superficie para incorporarse en una disolución de AlgBA en el rango de 0.1 a 0.5 % en peso.

Las nanopartículas se caracterizaron mediante ^{13}C-NMR y ^{29}Si-NMR para corroborar el éxito de la inmovilización de los segmentos de ácido borónico, mientras que el grado de funcionalización (1.7 moléculas/nm^2) se determinó mediante estudios de TGA y BET. A través de la reometría, se demostró que la incorporación de nanopartículas funcionalizadas con ácidos borónicos aumenta el módulo complejo G* y proporciona una mayor estabilidad frente a la deformación que el hidrogel con nanopartículas no funcionalizadas. Este efecto se atribuyó a la formación de enlaces covalentes dinámicos en la interfaz polímero-nanopartícula. Finalmente, se demostró cualitativa y cuantitativamente que los geles obtenidos son inyectables. Las nanopartículas aumentaron la fuerza necesaria para iniciar el flujo de los hidrogeles nanocompuestos a través de la jeringa y mostraron un buen control de inyectabilidad en solución, inyectabilidad en superficie y propiedades de auto reparación.

Turning waste into resources. Efficient synthesis of biopolyurethanes from used cooking oils and CO_2

Werlinger, F[1,2], Caballero, M. P.[3] Trofymchuk, O. S.[2] Flores, M. E.[1] Moreno-Villoslada, I.[1] Cruz-Martínez, F.[3] Castro-Osma, J. A.[3] Tejeda, J.[3] Martínez, J.[1] Lara-Sánchez, A.[3]

[1]Instituto de Ciencias Químicas, Facultad de Ciencias Isla Teja Universidad Austral de Chile, 5090000 Valdivia, Chile

[2]Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Departamento de Química Orgánica y Fisicoquímica, Universidad de Chile, Santiago 8380492, Chile.

[3]Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas, Científica Universidad de Castilla la Mancha, 13071 Ciudad Real, Spain.

Francisca.werlinger@uach.cl

Área Temática: Química de los Materiales.

Keywords: CO_2, Non-isocyanate polyurethanes, Cyclic Carbonates, Organocatalysts.

The coupling reaction of CO_2 and highly-substituted epoxides derived from renewable resources such as fatty acids and waste vegetable oils (cooking oils derived from olive and sunflower) leads to the synthesis of new bio-derived cyclic carbonates using efficient metal-free bifunctional organocatalysts under mild and solvent-free reaction conditions. Once cyclic carbonates derived from biobased sources were synthesized, the design of non-isocyanate polyurethanes (NIPUs) with different chemical structures was investigated by their reaction with a broad substrate scope of diamines. The NIPUs materials were characterized by spectroscopic techniques (NMR and IR) and their molecular weights and polydispersities were determined by GPC studies. Finally, thermal properties of the polymers were studied by DSC and TGA analyses.

We have designed a set of novel bifunctional bis-imidazole organocatalysts, which acted as efficient catalysts for the preparation of cyclic carbonates from epoxides and carbon dioxide under solvent-free conditions. An iodide derived compound showed the best performance for the formation of monosubstituted cyclic carbonates under moderate reaction conditions (80 ºC, 20 bar, 1 h) using just 0.75 mol% of the organocatalyst. Alternatively, the preparation of carbonated cooking olive oil and cooking sunflower oil, respectively, was successfully carried out from their precursor cooking oils by iodide catalyst. Finally, we achieved the formation of a wide range of non-isocyanate polyurethanes by the polyaddition reaction of cyclic carbonates with different diamines under moderate reaction conditions. All PHUs were obtained quantitatively at 80 ºC for 16 h in CH_3CN as solvent under the presence of 10 mol% of DBU as initiator. PHUs were synthesized as oligomers with low molecular weights (601–1726 g/mol) and moderate polydispersities (1.25–2.24) due to there was not a good control in the polymerization reaction and various chains with a huge variety of different molecular weights could be produced.

Referencias

Werlinger, F., Caballero, M. P., Trofymchuk, O. S., Flores, M. E., Moreno-Villoslada, I., De la Cruz-Martínez, F., Castro-Osma, J. A., Tejeda, J., Martínez, J., & Lara-Sánchez, A. (2024). Turning waste into resources. Efficient synthesis of biopolyurethanes from used cooking oils and CO_2. *Journal Of CO_2 Utilization*, *79*, 102659. https://doi.org/10.1016/j.jcou.2023.102659

Nanopartículas de magnetita modificadas con un gelificante de bajo peso molecular basado en L-Valina y ácido succínico para su uso en hipertermia

Guarnizo Franco, A.[1], Parra, M. E. [1], Lozano Ipus, J. E.[1]
[1]Grupo de investigación en Materiales Activos (G+), Universidad del Tolima, Departamento de Química, Ibagué, Tolima, Colombia.

aguarnizof@ut.edu.co

Área temática: Química de Materiales.
Palabras clave: Nanotransportador, iones metálicos, nanomaterial, gelador, fármacos.

Los gelificantes de bajo peso molecular (GBPM) son una clase de materiales blandos que han llamado la atención recientemente para ser aplicados en liberación controlada de fármacos. Estos forman geles mediante el autoensamblaje de pequeñas moléculas para formar una red interconectada capaz de retener un solvente y al mismo tiempo una sustancia bioactiva. Los agregados que forman van desde nanoestructuras hasta macroestructuras como los geles supramoleculares. La formación y ruptura de los geles ya sean nanoestructurados o macroestructurados, se puede controlar con estímulos externos como la temperatura y el pH.

De otro lado, la hipertermia ha atraído recientemente una atención significativa como un método seguro dentro de las terapias del cáncer. En el proceso, se aumenta la temperatura en los tumores a 41-46 °C, eliminando así las células. Este método implica la introducción de partículas ferromagnéticas o superparamagnéticas, como las nanopartículas de magnetita (MNPs) en el tejido tumoral, seguido de la irradiación utilizando un campo magnético de corriente alterna (CA). En general, las partículas magnéticas generan calor en un campo magnético de CA externo por diferentes mecanismos físicos.

En este estudio se sintetizó un nanohíbrido compuesto por un GBPM derivado del succinato, valina y dodecilato (SucValDoc) y, MNPs (Fe_3O_4@SucValDoc). Su estructura y composición se analizó por microscopía electrónica de transmisión (TEM) y barrido (SEM), análisis termogravimétrico (TGA), espectroscopía infrarroja con Transformada de Fourier (FT-IR) y dispersión dinámica de luz (DLS).

Para analizar la aplicabilidad del nuevo híbrido en procesos de hipertermia, se colocaron varias dispersiones del material en una bobina de inducción magnética, y se determinó la capacidad de la capacidad de absorción específica (SAR, por sus siglas en inglés), definida como la potencia transformada en calor por unidad de masa de nanopartículas (W/g). Se encontró que las Fe_3O_4@SucValDoc poseen un tamaño de partícula de alrededor de 15 nm y la SAR de 10 Wg^{-1}. Estas propiedades las hace adecuadas para una terapia de hipertermia.

Referencias

Perecin, C. J., Tirich, B. M., Nagamine, L. C. C. M., Porto, G., Rocha, F. V., Cerize, N. N. P., & Varanda, L. C. (2021). Aqueous synthesis of magnetite nanoparticles for magnetic hyperthermia: Formation mechanism approach, high water-dispersity and stability. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, *627*, 127169. https://doi.org/10.1016/J.COLSURFA.2021.127169

Sastri, T. K., Gupta, V. N., Chakraborty, S., Madhusudhan, S., Kumar, H., Chand, P., Jain, V., Veeranna, B., & Gowda, D. V. (2022). Novel Gels: An Emerging Approach for Delivering of Therapeutic Molecules and Recent Trends. *Gels*, *8*(5). https://doi.org/10.3390/GELS8050316

Włodarczyk, A., Gorgoń, S., Radoń, A., & Bajdak-Rusinek, K. (2022). Magnetite Nanoparticles in Magnetic Hyperthermia and Cancer Therapies: Challenges and Perspectives. *Nanomaterials 2022, Vol. 12, Page 1807*, *12*(11), 1807. https://doi.org/10.3390/NANO12111807

Nanopartículas de Oro Funcionalizadas con Gelificante Basado en L-Valina y Ácido Succínico: Aplicaciones Potenciales en Hipertermia

Guarnizo Franco, A.[1], Parra, M. E. [1], Lozano Ipus, J. E.[1]

[1]Grupo de investigación en Materiales Activos (G+), Universidad del Tolima, Departamento de Química, Ibagué, Tolima, Colombia.

aguarnizof@ut.edu.co

Área temática: Química de Materiales.

Palabras clave: Nanotransportador, nanomedicina, nanomaterial, gelador, fármacos.

Los gelificantes de bajo peso molecular (GBPM) son una clase de materiales blandos que han llamado la atención recientemente para ser aplicados en liberación controlada de fármacos. Estos forman geles mediante el autoensamblaje de pequeñas moléculas para formar una red interconectada capaz de retener un solvente y al mismo tiempo una sustancia bioactiva. Los agregados que forman van desde nanoestructuras hasta macroestructuras como los geles supramoleculares. La formación y ruptura de los geles ya sean nanoestructurados o macroestructurados, se puede controlar con estímulos externos como la temperatura y el pH.

De otro lado, la hipertermia ha atraído recientemente una atención significativa como un método seguro dentro de las terapias del cáncer. En el proceso, se aumenta la temperatura en los tumores a 41-46 °C, para provocar la muerte celular debido a la estimulación del plasmón de superficie por absorción de luz en las nanopartículas de oro (AuNPs), cuando son activadas por un láser.

En este estudio se sintetizó un nanohíbrido compuesto por un GBPM derivado del succinato, valina y dodecilato (SucValDoc) y, AuNPs (Au@SucValDoc). Para esto, primero se sintetizaron AuNPs por el método del citrato y luego se realizó una sustitución por SucValDoc. Su estructura y composición se analizó por microscopía electrónica de transmisión (TEM) y barrido (SEM), análisis termogravimétrico (TGA), espectroscopía infrarroja con Transformada de Fourier (FT-IR) y dispersión dinámica de luz (DLS), y resonancia magnética nuclear protónica (^{1}HNMR).

Se encontró que las AuNPs fueron modificas por el SucValDoc de manera efectiva, las cuales poseen un tamaño de partícula de alrededor de 13 nm. Se espera que este nuevo híbrido sea sometido a ensayos de hipertermia promovido por luz láser.

Referencias:

Amara, H., Nelayah, J., Creuze, J., Chmielewski, A., Alloyeau, D., Ricolleau, C., & Legrand, B. (2021). *Is There Really a Size effect on the Surface Energy of Nanoparticles?* https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03310351

Feng, X., Luo, Y., Li, F., Jian, X., & Liu, Y. (2021). Development of Natural-Drugs-Based Low-Molecular-Weight Supramolecular Gels. *Gels*, *7*(3). https://doi.org/10.3390/GELS7030105

Granja, A., Pinheiro, M., Sousa, C. T., & Reis, S. (2021). Gold nanostructures as mediators of hyperthermia therapies in breast cancer. *Biochemical Pharmacology*, *190*, 114639. https://doi.org/10.1016/J.BCP.2021.114639

Sastri, T. K., Gupta, V. N., Chakraborty, S., Madhusudhan, S., Kumar, H., Chand, P., Jain, V., Veeranna, B., & Gowda, D. V. (2022). Novel Gels: An Emerging Approach for Delivering of Therapeutic Molecules and Recent Trends. *Gels*, *8*(5). https://doi.org/10.3390/GELS8050316

Síntesis de nanohíbridos basados en nanosílice y celulosa obtenida a partir de linteres de algodón: Estabilidad termo-reológica y cinética de gelificación para tratamientos de conformance químico

Synthesis of nanohybrids based on nanosilica and cellulose obtained from cotton linters: Thermo-rheological stability and gelation kinetics for chemical conformance treatments

Moreno, P.[1], Burgos I.[1], Castro, R.[2], Romero, A.[1]

[1]Grupo de Investigación en Compuestos Orgánicos de Interés medicinal (CODEIM), Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.

[2]Grupo de Investigación en Fenómenos de Superficie Michael Polanyi, Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia.

pablo.moreno@correo.uis.edu.co

Área Temática: Química de Materiales.

Palabras clave: Celulosa, Carboximetilcelulosa, nanopartícula de sílice, nanohíbrido.

La celulosa es un biopolímero notable por su resistencia mecánica, biocompaibilidad y naturaleza renovable, a partir de ella, se puede transformar a carboximetilcelulosa, el cual, es un derivado valioso por sus propiedades espesantes, gelificantes y estabilizantes. Por otra parte, las nanopartículas de sílice presentan propiedades únicas como su gran superficie y estabilidad térmica, es por esto que la síntesis de nanohíbridos de nanosílice y celulosa es crucial para aplicaciones práctica como el conformance químico para la canalización del fluido de inyección hacia los pozos productores. Por lo tanto, en este estudio se investiga la estabilidad térmica, reológica y la cinética de gelificación de geles con diferentes concentraciones de nanohíbridos para optimizar su rendimiento y evitas problemas de inyección. En esta investigación se sintetizaron híbridos (NH-CMC-nSiO_2) a partir de carboximetilcelulosa (CMC) obtenida de celulosa extraída de linters de algodón y nanopartículas de sílice funcionalizadas. Una de las nanopartículas se obtuvo comercialmente (nSiO_2-2% APTES), mientras que las otras requirieron la correspondiente reacción de funcionalización con el respectivo aminosilano (APTES). Los precursores y productos se caracterizaron mediante técnicas espectroscópicas (FTIR-ATR, DLS, Pζ, XRD, XPS, SEM, EDS) y termogravimétricas (TGA y DSC). Por otro lado, se evaluó la capacidad viscosificante y de gelificación de las soluciones de NH-CMC-nSiO2 y de sus soluciones de biopolímeros precursores en diferentes condiciones de temperatura y salinidad. Los resultados revelan que los materiales híbridos muestran propiedades térmicas similares, pero difieren en morfología, estructura química y propiedades de cristalinidad respecto a los CMC. Posteriormente, se realizó un estudio de viscosidad en los nuevos materiales híbridos obtenidos; las viscosidades de los híbridos aumentaron significativamente en comparación con la carboximetilcelulosa. Por último, se evaluó la cinética de gelificación y la estabilidad térmica de los geles a diferentes concentraciones de los nuevos nanomateriales y del reticulante, validando que son adecuados para tratamientos de conformance químico.

Referencias

Castro, R. H., Corredor, L. M., Burgos, I., Llanos, S., Franco, C. A., Cortés, F. B., Idrobo, E. A., & Bohórquez, A. R. R. (2024). Synthesis and Characterization of New Nanohybrids Based on Carboxymethyl Scleroglucan and Silica Nanoparticles. *Nanomaterials*, *14*(6). https://doi.org/10.3390/nano14060499

Sydansk, R. D., & Moore, P. E. (1990). Production Responses in Wyoming's Big Horn Basin Resulting from Application of Acrylamide-Polymer/CrIII-Carboxylate Gels. *SPE/DOE Improved Oil Recovery Symposium*.

Caracterización de envases poliméricos Mediante Espectroscopía RAMAN y FTIR

Characterization of polymeric containers Using RAMAN and FTIR Spectroscopy

Almanza, A.[1], Cornejo A,[1], Cáceres, G.[2,3], Arjona, L.[2,3], Jaén, J.[3,4,5]

[1]Universidad de Panamá, estudiante de Química, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá,

[2]Departamento de Química Orgánica, Química Industrial, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

[3]Grupo de Investigación, Innovación y Desarrollo en Química Aplicada, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

[4]Departamento de Química Analítica, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

[5]Sistema Nacional de Investigadores de Panamá (SNI), Panamá, Panamá.

abdiel.almanza@up.ac.pa

Área: Química Orgánica y Química de Materiales.

Palabras claves: Polímeros, Raman, infrarrojo, espectroscopía, envases.

El uso de materiales poliméricos para contenedores de alimentos se ha incrementado en los últimos años, la razón se debe a su bajo costo, su tiempo de durabilidad y su versatilidad de uso. En los mercados locales de Panamá encontramos una gran cantidad de envases hechos de diversos polímeros como poliestireno (PS), polipropileno (PP), polietileno (PE), tereftalato de polietileno (PET) y cloruro de polivinilo (PVC). El uso que le da la población se adapta a su necesidad ya sea para contenedores de alimentos secos o líquidos, bebidas frías o caliente, alimentos ácidos e incluso se utiliza como recipientes para calentar la comida en microondas. La falta de regulaciones a nivel nacional ha permitido que grandes cantidades de materiales poliméricos entren al mercado sin la debida identificación del tipo de polímero que fue fabricado. En la actualidad existen equipos versátiles y robustos que nos permiten identificar estos materiales y contrastarlo con la información que registra el fabricante. Con el objetivo de caracterizar los polímeros más utilizados por la población panameña, se recolectó, por triplicados, diferentes contenedores de plásticos en distintos locales comerciales del país se caracterizaron utilizando dos técnicas analíticas, un espectrómetro Raman portátil y un espectrómetro infrarrojo por transformada de Fourier (FTIR). Lo primero que se realizó fue registrar la información que proporcionaba el fabricante (algunos envases no reflejaban el tipo de polímero de fabricación), seguidamente se identificaron mediante espectrómetro Raman y por último fueron identificados por FTIR. Los resultados que se obtuvieron del Raman portátil reflejan las firmas espectrales del polímero registrado por el fabricante y fueron confirmadas con el FTIR, para aquellos envases que no se tenía información se lograron identificar por ambas técnicas. La caracterización de los polímeros en los contenedores de alimentos recolectados en Panamá mostró que las técnicas de espectroscopía Raman y FTIR son herramientas efectivas y complementarias para la identificación de materiales poliméricos. La falta de regulaciones y control en el etiquetado de estos productos resalta la necesidad de implementar normativas más estrictas y sistemas de vigilancias aduanero para garantizar la seguridad de los consumidores.

Referencias

Chalmers, J. M., & Everall, N. J. (1996). FTIR, FT-Raman and chemometrics: applications to the analysis and characterisation of polymers. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, *15*(1), 18–25. https://doi.org/10.1016/0165-9936(96)88033-2.

Yvon, J. (2004). Raman Characterization of Polymers in Industrial Applications. *Application Note*, 1–3.

Síntesis de materiales compuestos con potencial aplicación como fotocatalizadores para la producción de hidrogeno en una celda fotoelectroquímica

Synthesis of composite materials with potential application as photocatalysts for hydrogen production in a photoelectrochemical cell

Calderón, L.[1], Mejía-Ospino, E.[1], Cabanzo, R.[1]

[1]Laboratorio de Espectroscopía Atómica y Molecular (LEAM), Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.

lizeth2238069@correo.uis.edu.co

Área temática: Química de Materiales

Palabras clave: hidrógeno, fotoelectrocatálisis, dióxido de titanio, óxido de grafeno, fotocatalizadores.

El mayor desafío al que nos enfrentamos hoy como sociedad es la búsqueda de fuentes de energía que sean respetuosas con el medio ambiente. El hidrógeno se perfila como una de las alternativas más prometedoras para sustituir los combustibles fósiles basados en el carbón que actualmente satisfacen las necesidades energéticas del mundo. Su producción mediante fotoelectrocatálisis representa un proceso innovador que podría transformar el panorama energético en uno más limpio y sostenible. Para llevar a cabo este proceso, es necesario contar con un material fotocatalizador que sea eficiente y que permita la conversión de la mayor parte de la energía luminosa en energía química. El dióxido de titanio (TiO_2) y el óxido de bismuto (Bi_2O_3) tienen las características adecuadas para actuar como fotocatalizadores, ya que tienen alta estabilidad térmica, química y electroquímica, alta eficiencia fotocatalítica y son estables en soluciones acuosas. Sin embargo, se propone combinarlos con óxido de grafeno (GO) para mejorar sus propiedades, ya que este compuesto ayuda a prolongar la vida útil de los portadores de carga fotoinducidos, mejora la separación y extracción de carga y promueve la actividad fotocatalítica de los fotocatalizadores basados en este material. En este trabajo se sintetizaron nanocompuestos de dióxido de titanio y óxido de bismuto soportados sobre óxido de grafeno (TiO_2@GO y Bi_2O_3@GO) utilizando el método de síntesis solvotermal. La caracterización de los materiales compuestos se llevó a cabo mediante técnicas de espectroscopia infrarroja (IR), espectroscopia Raman, difracción de rayos X (DRX) y espectroscopia de reflectancia difusa (DRS). Los resultados mostraron que se obtuvieron los óxidos metálicos soportados en óxido de grafeno y se evidenció una disminución de la energía de banda prohibida (Bandgap) de estos materiales lo cual permite concluir que tienen potencial aplicación como materiales fotocatalizadores en el proceso de producción de hidrógeno bajo irradiación con luz visible.

Referencias

Nasir, A., Khalid, S., Yasin, T., & Mazare, A. (2022). A Review on the Progress and Future of TiO2/Graphene Photocatalysts. *Energies*, *15*(17), 6248. https://doi.org/10.3390/en15176248

Esswein, A. J., & Nocera, D. G. (2007). Hydrogen Production by Molecular Photocatalysis. *Chemical Reviews*, *107*(10), 4022-4047. https://doi.org/10.1021/cr050193e

Utilización de electrodo de carbón vítreo dopado con poli anilina en la determinación de urea en soluciones acuosas por técnicas electroquímicas

Use of glassy carbon electrode doped with polyaniline for the determination of urea in aqueous solutions by electrochemical technics.

Fernandez, A.[1], Briceño, S[1,2]

[1]Escuela de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Yachay Tech, Urcuquí, Ecuador.

[2]Escuela de Ciencias Física y Nanotecnología, Universidad Yachay Tech, Urcuquí, Ecuador.

alexis.fernandez@yachaytech.edu.ec

Área Temática: **Química de Materiales.**

Palabras Clave: Urea, amperometría, cv, polianilina, dopaje.

La urea es un compuesto de alta utilización en la agricultura como fertilizantes; no obstante, el exceso de esta puede ser distribuida en diversos ecosistemas generando un impacto negativo que sea a nivel ambiental como en el diagnóstico médico. Dado este caso, la aplicación de técnicas electroquímicas han sido significativamente relevantes en la identificación de contaminantes acuosos; ya que, estos destacan por su alta sensibilidad, facilidad de uso, rapidez, y bajo costo. El trabajo en el material de determinación ha mejorado la selectividad y rango de detección de analitos, pudiendo así destacar materiales como la anilina, la cual polimerizada, permite una mayor afinidad del analito.

Entre la variedad de electrodos empleados, el carbono vítreo, es conocido por ser inerte, esto lo presenta como un material versátil en las aplicaciones analíticas. Por ello, su funcionalización mediante el dopaje con polianilina potencia la conductividad y facilita la detección.

Se emplea reactivos como la urea para generar una correlación lineal, y en la modificación de la superficie del electrodo se emplea ácido sulfúrico, anilina a través de procesos de barrido con ayuda del potenciostato.

Los puntos por considerar son: la determinación de urea con electrodo de carbón vítreo sin dopaje a diferentes concentraciones a través de amperometría para establecer la curva de calibración 0, preparación de solución H_2SO_4 0.5M y anilina 0.1M en la celda mediante la aplicación de un voltaje en barrido para dopar el electrodo. Limpiar los materiales sin retirar el polímero y medir las distintas concentraciones de urea para tener una curva de calibración. Determinación de los límites de detección y cuantificación e incorporar una muestra problema para determinar su concentración y comparar los valores con el electrodo si modificación.

La concentración por medir debe superar los 100ppm para mostrar algún cambio en la gráfica generada. Siendo así, el intervalo de la curva emplea el intervalo de 100-1000ppm con el seguimiento de amperometría y voltametría cíclica.

De este seguimiento, se resalta la aplicabilidad de la electroquímica en técnicas de determinación de analitos, y de la sensibilidad de estos a concentraciones relativamente bajas con la adaptación necesaria.

Referencias

Polyaniline thin film prepared by electrochemical polymerization method. (2021). *Biointerface Research in Applied Chemistry*, *12*(4), 5523–5533. https://doi.org/10.33263/briac124.55235533

Quadrini, L., Laschi, S., Ciccone, C., Catelani, F., & Palchetti, I. (2023). Electrochemical methods for the determination of urea: Current trends and future perspective. *Trends in Analytical Chemistry: TRAC*, *168*(117345), 117345. https://doi.org/10.1016/j.trac.2023.117345

Diseño de Nanocápsulas Poliméricas Como Vehículos Para La Liberación Controlada de Hierro

Design of Polymeric Nanocapsules as Carriers for Controlled Release of Iron

Camacho, V.[1], Pérez, L. D.[1]

[1]Grupo de Investigación en Macromoléculas, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

Covcamachoa@unal.edu.co

Área Temática: Química de Materiales.

Palabras clave: Copolímero; encapsulación; doble emulsión; liberación.

El desarrollo de formulaciones basadas en especies de hierro encapsuladas en sistemas particulados como estrategia para tratar la anemia, ha mostrado mejores resultados en la reducción de las deficiencias de hierro en comparación con las sales solubles. Por ello, esta investigación propone diseñar un sistema de nanocápsulas poliméricas basadas en copolímeros de polietilenglicol-*bloque*-policaprolactona (mPEG-*b*-PCL) para la administración y liberación controlada de hierro.

Para sintetizar los copolímeros, ε-caprolactona se polimerizó partiendo de mPEG 2kDa y 5kDa como macroniciador, vía polimerización por apertura de anillo empleando octaoato de estaño como catalizador. Como fuente de hierro se empleó sulfato ferroso.

Los copolímeros se caracterizaron por cromatografía de permeación en gel (GPC), ^{1}H-RMN y FT-IR. Se empleó la metodología de doble emulsificación para preparar las nanocápsulas. Las nanocápsulas se caracterizaron mediante TEM, dispersión dinámica de luz (DLS), medidas de potencial ζ y calorimetría diferencial de barrido (DSC). La eficiencia de la encapsulación (EE) se determinó mediante espectrometría UV-Vis utilizando *o*-fenantrolina. La liberación de hierro se caracterizó por diálisis.

El peso de los copolímeros sintetizados estuvo entre 30-40 kg/mol, sus Đ fueron menores a 1,5. Al caracterizar las nanocápsulas, se observan nanopartículas esféricas con tamaños <550nm, y que sus diámetros aumentan con la adición del hierro. En DSC, luego de la adición de hierro a las nanopartículas, el pico endotérmico asociado a la fusión se desplazó a una menor temperatura. Se halló que el copolímero con el mayor peso molecular presentó la más alta EE; 74,4%.

El aumento del diámetro en las nanopartículas se debe a la mayor tensión interfacial en la segunda emulsión, causada por la interacción del hierro con segmentos hidrófilos, formando partículas más grandes. Una mayor longitud del segmento de policaprolactona puede mejorar la organización estructural en la nanocápsula, proporcionando una encapsulación más eficiente y estable.

Se encapsuló hierro utilizando mPEG-*b*-PCL como precursor y se obtuvieron nanopartículas con tamaños <550nm. Se demuestra una relación directa entre el tamaño del copolímero y la eficiencia de encapsulación, y una liberación de hierro sostenida durante 24h, este podría ser un sistema de administración atractivo para terapias convencionales.

Referencias

Durán, E., Villalobos, C., Churio, O., Pizarro, F., & Valenzuela, C. (2017). Encapsulación de hierro: Otra estrategia para la prevención o tratamiento de la anemia por deficiencia de hierro. *Revista chilena de nutrición, 44*(3), 234-243. https://doi.org/mzqc

Angarita, V., Umaña, A., & Perez, L. (2020). Enhancing the performance of PEG- b -PCL-based nanocarriers for curcumin through its conjugation with lipophilic biomolecules. *Journal of Bioactive and Compatible Polymers, 35*, 399-413. 10.1177/0883911520944416

Desarrollo de un bioinsecticida a partir de aceites esenciales encapsulados en nanopartículas poliméricas con estructura “core-shell”

Development of a bioinsecticide from essential oils encapsulated in polymeric nanoparticles with a “core-shell” structure

Rodríguez, M.[1], Pérez, L.D.[1]

[1]Grupo de Investigación en Macromoléculas, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

maarodriguezfe@unal.edu.co

Área Temática: Química de Materiales.

Palabras clave: encapsulación, aceites esenciales, metacrilatos, nanopartículas, liberación controlada.

El uso de pesticidas perjudiciales para el medio ambiente ha aumentado por la presencia de plagas resistentes. Además, las trazas de estos productos plantean riesgos para la salud. Una opción son los biopesticidas compuestos de aceites esenciales (AE), caracterizados por su baja toxicidad y seguridad ambiental. No obstante, sus propiedades fisicoquímicas plantean desafíos para su uso. Para abordar esto, han surgido materiales poliméricos que pueden encapsular AE preservando sus propiedades funcionales, resaltando los metacrilatos por su estabilidad química, baja toxicidad y biocompatibilidad.

Las nanopartículas poliméricas se obtuvieron a partir de copolímeros sintetizados por polimerización en emulsión de ésteres metacrílicos. Se optimizaron las condiciones de síntesis para la polimerización. Las partículas se caracterizaron para conocer su morfología, tamaño y composición, para finalmente establecer la relación entre propiedades estructurales con la capacidad de encapsulación.

Los látex resultantes fueron caracterizaron mediante microscopía electrónica de transmisión (TEM) y dispersión dinámica de luz (DLS) para determinar su tamaño y morfología, técnicas espectroscópicas como FTIR y ^{1}H NMR para corroborar su composición. La encapsulación de AEs se estudió mediante DLS y ensayos de mortalidad con plagas comunes en maíz. Finalmente, examinamos las relaciones entre las propiedades estructurales y la composición con la capacidad de encapsulación y liberación de AEs.

Las nanopartículas poliméricas presentaron morfología esférica con distribución estrecha de tamaño de partícula e inferiores a los 100 nm. Son estables térmicamente hasta los 200 º C, su temperatura de transición vítrea es subambiente, con una capacidad de encapsulación alrededor del 100 %. Las nanopartículas poliméricas con AE fueron evaluadas en plagas comunes de maíz mostrando una tasa de mortalidad del 80 % a las 24 horas.

Los resultados obtenidos evidencian que las condiciones de síntesis son reproducibles, obteniendo partículas nanométricas homogéneas, de composición conocida, capaces de encapsular y liberar de forma controlada AE, mostrando una alta tasa de mortalidad en plagas comunes de maíz, siendo una solución prometedora para la formulación de bioinsecticida.

Referencias

Pavela, R., & Sedlák, P. (2018). Post-application temperature as a factor influencing the insecticidal activity of essential oil from Thymus vulgaris. *Industrial Crops and Products*, *113*, 46-49. https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2018.01.021.

Froiio, F., Ginot, L., Paolino, D., Lebaz, N., Bentaher, A., Fessi, H., & Elaissari, A. (2019). Essential Oils-Loaded Polymer Particles: Preparation, Characterization and Antimicrobial Property. *Polymers*, *11*(6), 1017. https://doi.org/10.3390/polym11061017.

Desempeño de la ZIF-71(ClBr) en la separación de una mezcla ABE

Performance of ZIF-71(ClBr) in the separation of an ABE mixture

Norma Tiempos Flores[1], Eugenio Hernandez-Fernandez[1], Alan Rico-Barragan[1], J. Raziel Álvarez[1], David J. Michaelis[2], Nancy E. Davila-Guzman[1]

[1]Universidad Autónoma de Nuevo León, Monterrey, México.

[2] Brigham Young University, Provo, Estados Unidos.

norma.tiemposflr@uanl.edu.mx

Área Temática: Química de Materiales.

Palabras clave: MOF, adsorción, hidrofobicidad, ABE.

Una solución para reducir el impacto ambiental generado por los combustibles fósiles es el uso de energías alternativas como lo son los biocombustibles. Sin embargo, uno de los desafíos más importantes en la producción de biocombustibles es aumentar la eficiencia en su purificación. Los materiales hidrofóbicos son ideales para este propósito, tales como las estructuras zeolíticas de imidazol (ZIF), las cuales han demostrado ser eficientes en los procesos de purificación. El objetivo de este trabajo fue sintetizar una ZIF con mayor carácter hidrofóbico que sus análogos reportados en la literatura, para la purificación de una mezcla sintética de acetona butanol y etanol (ABE).

Los materiales utilizados son el ligante 4-cloro-5-bromoimidazol, acetato de zinc, metanol, hexano, diclorometano y formiato de sodio.

Se sintetizó una ZIF análoga a la ZIF-71, denominada ZIF-71(ClBr), a través de la reacción del ligante 4-cloro-5-bromoimidazol con acetato de zinc en metanol (Bhattacharyya et al., 2017). Un posterior cambio de disolvente a través de una activación térmica produjo la estructura llamada ZIF-71(ClBr)-SE. Se evaluó la capacidad de adsorción de la ZIF-71(ClBr) y se comparó con la ZIF-71 y la ZIF-8 en la adsorción de acetona, butanol y etanol en muestras individuales y en la mezcla ABE.

La caracterización por difracción de rayos X de polvos reveló que la ZIF-71(ClBr) y ZIF-71(ClBr)-SE son isoestructurales a la ZIF-71, con un carácter hidrofóbico evaluado a través del análisis estático del ángulo de contacto con agua de 126° y 130° respectivamente. Las pruebas de adsorción en soluciones individuales mostraron una mayor capacidad de adsorción de acetona>butanol>etanol. Los resultados de los experimentos de adsorción en la mezcla ternaria mostraron que la ZIF-71(ClBr)-SE presentó la misma capacidad de adsorción para acetona y butanol.

Con estos resultados podemos concluir que la ZIF-71(ClBr)-SE presenta una mayor selectividad hacia la acetona y butanol, los adsorbatos más hidrofóbicos, en comparación con el etanol, el adsorbato más polar; demostrando de esta manera su carácter hidrofóbico.

Referencias

Bhattacharyya, S., Jayachandrababu, K. C., Chiang, Y., Sholl, D. S., & Nair, S. (2017). Butanol Separation from Humid CO2-Containing Multicomponent Vapor Mixtures by Zeolitic Imidazolate Frameworks. *ACS Sustainable Chemistry and Engineering*, *5*(10), 9467–9476. https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.7b02604

Tiempos-Flores, N., Hernández-Fernández, E., Rico-Barragan, A., Raziel Álvarez, J., Juárez-Ramírez, I., Garza-Navarro, M. A., Rodríguez-Hernández, J., Fonseca-García, A., Michaelis, D. J., & Davila-Guzman, N. E. (2022). Enhanced hydrophobicity of modified ZIF-71 metal-organic framework for biofuel purification. *Polyhedron*, *217*(February), 115736. https://doi.org/10.1016/j.poly.2022.115736

Caracterización de micelas poliméricas derivadas del autoensamble de copolímeros de monometoxi-poli(etilenglicol)-poli(ε-caprolactona)

Characterization of polymeric micelles derived from the self-assembly of monomethoxy-poly(ethylene glycol)-poly(ε-caprolactone) copolymers

Bermúdez, J.[1], Pérez, L. D.[1]

[1]Grupo de Investigación en Macromoléculas, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

jobermudezv@unal.edu.co

Área Temática: Química de Materiales.

Palabras clave: copolímero; micela; concentración micelar crítica; tamaño de partícula.

Las micelas polimericas son muy útiles para el suministro compuestos insolubles en agua y su posterior liberación. La concentración a la que se forman las primeras micelas en una fase líquida se denomina concentración micelar crítica (CMC), esta CMC puede ser medida mediante dispersión dinámica de luz (DLS). Esta investigación se centra en el estudio de derívados anfifilicos de mPEG-*b*-PCL mediante DLS.

Se usaron copolímeros previamente sintetizados y caracterizados. En DLS se trabajó de 15 a 40°C con un angulo de 90° y en fluorescencia se excitó a 390nm a 20°C. Para ambas se usó una celda de cuarzo.

Se prepararon soluciones de distintas concentraciones de m-PEG_{56}-*b*-PCL_{50}, m-PEG_{61}-*b*-PCL_{256}, m-PEG_{55}-*b*-PCL_{16} y m-PEG_{55}-*b*-PCL_{16}-Linoleico, las cuales fueron mediadas por DLS y por fluorescencia para corroborar los resultados, además, se realizó el mismo procedimiento con Span 80 de CMC conocida.

Los valores de DLS y fluorescencia son similares entre sí, y los valores de CMC para Span 80 estuvieron cerca de la literatura. Se evaluó el efecto de la temperatura de trabajo sobre la CMC y se encontró que no tiene ningún impacto, de igual menera, no existe dependencia del diámetro de partícula con la temperatura y la concentración. Se encontraron tamaños promedio con bajo índice de polidispersidad y un mayor tamaño para m-PEG_{55}-*b*-PCL_{16}-Linoleico.

Los valores de CMC obtenidos por DLS se corroboraron mediante fluorescencia y el Span 80. Que no exista un efecto de la temperatura en la CMC y en el tamaño permite prologar la vida media de los compuestos en el cuerpo humano, y, que tampoco exista efecto de la concentración en el tamaño, nos asegura una liberación controlada a medida que el copolímero se diluye en el cuerpo. El tamaño obtenido del m-PEG_{55}-*b*-PCL_{16}-Linoleico se debe a su estructura de tres bloques.

Mediante DLS es posible calcular la CMC para copolímeros de m-PEG-*b*-PCL. Se demostró que la CMC y el tamaño no dependen de la temperatura, y este último, tampoco de la concentración. Se alcanzaron índices de polidispersidad bajos y se encontró la dependencia del tamaño en la cantidad de bloques.

Referencias

DataPhysics Instruments GmbH. (s. f.). Critical micelle formation concentration explained - DataPhysics Instruments. https://www.dataphysics-instruments.com/knowledge-hub/cmc/

Vidal-Paruta, M. R., & King, L. D. (1964). Critical Micelle Concentration of Nonionic Surfactants in Water and Carbon Tetrachloride. Journal Of Pharmaceutical Sciences, 53(10), 1217-1220. https://doi.org/10.1002/jps.2600531020

Implementación de polimerizaciones controladas para la fabricación de estándares de peso molecular basados en polimetilmetacrilato, poliestireno y policaprolactona

Implementation of controlled polymerizations for the manufacture of molecular weight standards based on polymethylmethacrylate, polystyrene and polycaprolactone

Bermúdez, J.[1], **Pérez, L. D.**[1]

[1]Grupo de Investigación en Macromoléculas, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

jobermudezv@unal.edu.co

Área Temática: Química de Materiales.

Palabras clave: síntesis; estándar; peso molecular; cromatografía de permeación en gel.

En Colombia, las empresas dedicadas a la producción y procesamiento de plásticos se están viendo obligadas a pasarse a la producción de polímeros biodegradables. Esa transición requiere asegurar pesos moleculares exactos, debido a que estos pueden influir en gran medida en sus propiedades finales. El peso molecular puede ser medido mediante cromatografía de permeación en gel (GPC), esta técnica permite conocer la distribución de pesos moleculares en una muestra de polímero a partir de estándares de peso conocido. El objetivo de este proyecto es la síntesis de estándares de PMM, PS y PCL para la determinación de pesos moleculares mediante GPC.

Para la síntesis de los polímeros, se emplearon sus respectivos monómeros de metilmetacrilato, estireno y ε-caprolactona. Se usaron planchas de agitación para regular la temperatura y la agitación.

Las técnicas usadas para la síntesis de los estándares fueron: activadores generados por transferencia de electrones - polimerización radicalaria por transferencia de átomo (AGET-ATRP) para PMM y PS, y polimerización por apertura de anillo (ROP) para PCL.

Se optimizaron las condiciones para la síntesis de los estándares, obteniendo sets de 15 distintos pesos moleculares para cada polímero entre 2kDa a 2000kDa, realizando la caracterización de sus pesos moleculares absolutos mediante ^{1}H-RMN, dispersión dinámica de luz (DLS) y viscosimetría.

La generación de estándares de biopolímeros poco disponibles en el mercado descarta la necesidad de calcular pesos moleculares relativos a un estándar como el poliestireno y se mejora la exactitud al realizar las calibraciones con estándares del mismo polímero. Las caracterizaciones mediante las distintas técnicas dieron pesos absolutos muy similares entre sí y con distribuciones estrechas, corroborando los pesos. Además, las curvas calibración en GPC demostraron buena linealidad.

Se encontraron las mejores condiciones de síntesis, mediante las técnicas usadas, para la obtención de estándares con pesos moleculares entre 2kDa a 2000kDa de PMM, PS y PCL, cada uno con un set de 15 pesos, caracterizados por distintas técnicas de medición de pesos moleculares absolutos y aptos para su uso en GPC.

Referencias

Torres, A. R. (2024, 22 marzo). Implementar la Ley de plásticos podría afectar la economía y el empleo en la industria. *Diario la República*. https://www.larepublica.co/economia/implementar-la-ley-de-plasticos-podria-afectar-la-economia-y-el-empleo-en-la-industria-3827582

Podzimek, S. (1994). The use of GPC coupled with a multiangle laser light scattering photometer for the characterization of polymers. On the determination of molecular weight, size and branching. *Journal Of Applied Polymer Science*, *54*(1), 91-103. https://doi.org/10.1002/app.1994.070540110

Caracterización química de pasivos mineros en Tilarán, Guanacaste, Costa Rica, a través de las técnicas de espectrofotometría de absorción atómica y fluorescencia de Rayos X de tipo energía dispersiva

Chemical characterization of mining liabilities in Tilarán, Guanacaste, Costa Rica, through atomic absorption spectrophotometry and energy-dispersive X-ray fluorescence techniques

Rojas-Conejo, J.[1,2], **López-Maietta, M.T**[1], **Mejicano-Rodríguez, M. F.**[1], **Watson-Sánchez, E.**[3]

[1]Centro de Recursos Hídricos para Centroamérica y El Caribe (HIDROCEC), Sede Regional Chorotega, Universidad Nacional, Liberia, Costa Rica.

[2]Universidad Rey Juan Carlos, Madrid, España.

[3]Laboratorio de Química de Alimentos, Sede Guanacaste, Universidad de Costa Rica, Liberia, Costa Rica.

johanna.rojas.conejo@una.ac.cr, maria.lopez.maietta@una.cr, mary.mejicano.rodriguez@est.una.ac.cr y ELIAN.WATSON@ucr.ac.cr

Área temática: Química Ambiental y Agrícola.

Palabras clave: caracterización, espectrofotometría, fluorescencia, pasivos, minería.

Los pasivos mineros pueden contaminar suelos, aguas subterráneas y superficiales con metales tóxicos, impactando negativamente el medio ambiente. Esta investigación comparó dos métodos analíticos para caracterizar pasivos mineros cercanos al río San José, en el Líbano de Tilarán, Guanacaste, Costa Rica. Estos pasivos fueron generados en los años 90 por la empresa Minera Ariel tras cesar operaciones en la mina La Esperanza y contienen minerales como pirita y cuarzo de vetas epitermales tipo sado. Se realizaron mediciones físico-químicas en campo utilizando equipos para pH y conductividad eléctrica en suelo (Hanna Instruments modelos HI99121 y HI98331). Las muestras, recolectadas a 20 cm de profundidad, fueron procesadas en laboratorio mediante digestión por microondas (CEM modelo MARS Xpress), análisis espectrofotométrico de absorción atómica electrotérmica (ETAAS) (Analytik Jena modelo ZEEnit 700 P) y fluorescencia de Rayos X de energía dispersiva (EDXRF) (Malvern Panalytical modelo Epsilon 1) para caracterizar químicamente los residuos. Los resultados mostraron niveles significativos de los metales analizados: medias de 21 550 mg/kg (ETAAS) y 19 225 mg/kg (EDXRF) de hierro, 164.5 mg/kg (ETAAS) y 144.6 mg/kg (EDXRF) de plomo, 132.9 mg/kg (ETAAS) y 125.0 mg/kg (EDXRF) de arsénico y 0.34 mg/kg (ETAAS) y 0.36 mg/kg (EDXRF) de cadmio. Se observaron diferencias significativas en la dispersión de los datos de plomo entre ambas técnicas, mientras que los demás parámetros mostraron dispersión similar. Los resultados de hierro y arsénico indicaron una distribución
moderada con coeficientes de variación entre 10% y 30%, mientras que para cadmio y plomo se encontraron distribuciones más heterogéneas y variables (CV > 30%). A pesar de la calibración en el EDXRF, no se compensó completamente el efecto de la heterogeneidad de la matriz del pasivo sobre la técnica analítica, sugiriendo la necesidad de explorar tratamientos adicionales para homogenizar las muestras antes de los análisis.

Referencias

Fiamegos, Y., & de la Calle Guntiñas, M. B. (2018). Validation strategy for an ED-XRF method to determine trace elements in a wide range of organic and inorganic matrices based on fulfilment of performance criteria. *Spectrochimica Acta - Part B Atomic Spectroscopy*, *150*, 59–66. https://doi.org/10.1016/j.sab.2018.10.009

Rojas Conejo, J., Picado Pavón, F., Suárez Serrano, A., Van Gestel, C. A. M., Golcher Benavides, C., & Durán Sanabria, G. (2022). Pasivo ambiental minero: una fuente potencial de contaminación por metales para los ecosistemas de agua dulce en Costa Rica. *Revista Geográfica de América Central, 1*(68), 333-356. https://dx.doi.org/10.15359/rgac.68-1.12

Desempeño de superficies a base de polímeros y de solventes polares con soluciones de petróleo/hexano

Performance of polymeric surfaces and polar solvent with petroleum/hexane solutions

Rodríguez-Ruiz, J.[1,2] Azevedo Esperidião, M.[2] Meza-Fuentes, E.[3]
[1]Centro Para la Industria Petroquímica-SENA, Cartagena, Colombia.
[2]LADPOL, Universidade Federal da Bahia, Salvador, Brasil
[3]Grupo de Estudios en Materiales y Combustibles, Universidad de Cartagena, Cartagena, Colombia.

jrodriguezr@sena.edu.co

Área Temática: Química de Materiales.
Palabras clave: Petróleo; polímeros; polipropileno.

El petróleo de muchas regiones del mundo, así como las fracciones más pesadas de los pozos que han sido explotados previamente poseen un alto contenido de parafinas que dificulta su transporte a través de ductos. Esto conduce a la formación de depósitos sólidos, compuestos principalmente de hidrocarburos con un número de carbono de C30 a C65, lo que provoca cambios en el comportamiento reológico del petróleo y la formación de incrustaciones en las paredes internas de las tuberías y equipos utilizados para el transporte. Algunas técnicas han sido usadas para minimizar los problemas causados por la deposición de parafinas y su adhesión a las paredes de oleoductos y equipos, el revestimiento de los ductos con materiales poliméricos se ha mostrado como una buena alternativa. En este trabajo, las variaciones del ángulo de contacto de diferentes superficies poliméricas; policarbonato (PC), poli(cloruro de vinilo) (PVC), poli(etileno-co-1-octeno) (PELAD), poli(etileno-co-1-buteno) (PELBD) y polipropileno (PP) fueron investigadas en diferentes solventes y concentraciones de petróleo en hexano. El ángulo de contacto de avance (θa) y de retroceso (θr) se determinaron usando el método de Wilhelmy. La adición de petróleo a hexano en una proporción del 5% provocó una disminución pronunciada del ángulo de contacto en todas las superficies estudiadas. El orden de disminución del θa fue PC> PVC > PP > PELAD > PELBD. En el caso del PP, el ángulo de contacto de avance (θa) aumenta con el aumento de la concentración de petróleo y el mayor θa se observa en esta superficie. Las características de mojabilidad de las superficies examinadas varían de forma compleja con la polaridad del medio. Esto se atribuye a las variaciones en las proporciones de grupos polares y apolares en la cadena y la naturaleza química de estos grupos, o sea, la estructura química y molecular del polímero. Entre los polímeros estudiados aquel que se mostró menos influenciable por las fluctuaciones en la naturaleza química del solvente y las variaciones en la concentración del petróleo fue el PP.

Referencias

Hussein, A. (2023). Paraffin deposition. En Essentials of Flow Assurance Solids in Oil and Gas Operations (pp. 145-162). Editorial Gulf Professional Publishing, Elsevier.

Estudio morfológico de nano-apatitas depositadas sobre andamios de Ácido Poliláctico impresos por FDM

Morphologial study of nanoapatite coatings on Polilactic Acid scaffoldings printed by FDM

Morejón-Alonso L.[1], García Torres L.M.[2], González-Ruiz J.E.[2], Bada Rivero N.[2], Sirgado Pérez N.[3], Rivas Santana M.[4]

[1]Departamento de Química General e Inorgánica, Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba

[2]Centro de Biomateriales, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba

[3]Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba

[4]Centro de Fabricación Avanzada, Universidad de Matanzas, Matanzas, Cuba

lmorejon@fq.uh.cu

Área Temática: Química de Materiales.

Palabras Clave: ácido polilático, scaffolds, hidroxiapatita, deposición biomimética, soluciones supersaturadas en calcio.

Los andamios son estructuras artificiales en 3D utilizados en la reparación o regeneración de tejidos y órganos dañados que imitan la estructura ósea y actúan como matriz temporal para la proliferación celular. En la fabricación de andamios personalizados con tamaño y estructura de poros controlados, pueden emplearse técnicas de prototipado rápido utilizando materiales como el ácido poliláctico (PLA), polímero termoplástico biocompatible y biodegradable que posee excelentes propiedades mecánicas. Sin embargo, para reducir las barreras a la adhesión celular es necesario modificar químicamente su superficie ya que el PLA es altamente hidrofóbico y carece de sitios de unión bioquímica que promuevan y la interacción célula-biomaterial.

El trabajo propone la obtención y caracterización de recubrimientos bioactivos de hidroxiapatita sobre andamios de PLA obtenidos por Modelado por Deposición Fundida (FDM) mediante la activación previa del sustrato en NaOH y posterior utilización de soluciones sobresaturadas en calcio (SCS) bajo diferentes esquemas de deposición como alternativa al método biomimético tradicional. Para determinar los cambios morfológicos y microestructurales se utilizó la Microscopía Electrónica de Barrido.

Los resultados mostraron que fue posible modificar la superficie de los andamios de PLA mediante la deposición de hidroxiapatita (HA) nanoestructurada a partir de la activación en medio alcalino del PLA y posterior inmersión en SCS mediante una metodología novedosa. El ajuste de pH durante la precipitación juega un papel determinante en la composición química de los recubrimientos, permitiendo obtener recubrimientos más homogéneos formados por HA. El tratamiento térmico utilizado como vía de mejorar la adherencia, no produce cambios apreciables en la morfología de los recubrimientos cuando se lleva a cabo a 60 °C; sin embargo, un aumento de la temperatura hasta 100 °C produce una disminución de la porosidad debido a un aumento de la densificación de los recubrimientos.

Síntesis no convencional de óxido de zinc a escala nanométrica empleando extracto etanolico de hojas de Calea sessiliflora Less

Non-conventional synthesis of zinc oxide on a nanometric scale using ethanol extract of Calea sessiliflora Less leaves

López, C.[1], Cabanzo, A.[2]

[1,2]Grupo de investigación Química de Compuestos Bioactivos (QCB), Universidad del Cauca, Popayán, Colombia.

lcjuan@unicauca.edu.co

Área Temática: Química de materiales.

Palabras clave: Nanotecnología, óxido de zinc, Calea sessiliflora Less, Metabolito secundario.

La nanotecnología está avanzando de ser una visión futurista a una realidad tangible, se prevé que generará productos e innovaciones que respondan a problemas actuales de la sociedad. Colombia y su biodiversidad, incluye numerosas especies vegetales de la familia Asteraceae, usadas en medicina tradicional, pero poco estudiadas científicamente. En esta investigación, se realizó la síntesis de nanopartículas de óxido de zinc usando extractos etanólicos de la planta C. sessiliflora Less conocida comúnmente como (Chicharrón) del Departamento del Cauca (Colombia).

Las hojas de C. sessilifora Less, se procesaron hasta obtener un polvo fino. Se obtuvo el extracto etanólico mezclando polvo de hojas y una relación de etanol/agua, donde se realizó un diseño factorial completo 2^3 escogiendo los extractos con mayor masa para la síntesis. Una solución de $Zn(NO_3)_2 * 4H_2O$ en agua desionizada, se mezcló con el extracto vegetal y se ajustó el pH. La mezcla se irradió durante 8 minutos en un horno microondas (FLEXIWAVE, 600-800W), el residuo blanco sedimentado se filtró al vacío y se calcinó en mufla, obteniendo un polvo blanco.

En el análisis de espectroscopia FTIR, el extracto mostró bandas características de metabolitos secundarios como fenoles, triterpenos, alcaloides y cumarinas; compuestos bioactivos cruciales, porque actúan como agentes reductores y estabilizadores en la síntesis de nanopartículas. La presencia de una banda en 450 cm^{-1} en el espectro es indicativa de las vibraciones del estiramiento Zn-O, confirmando la formación de óxido de zinc. En el análisis de espectroscopía Raman, medido en un intervalo de 200 – 2200cm-1, se identificó los modos E2 Low (~ 99cm-1) asociado a la vibración subred del Zn y E2 High (~ 438cm-1), a los átomos de oxígeno. Los resultados son consistentes con la estructura cristalina hexagonal wurtzita del ZnO. En la espectroscopia UV-Vis, se identificó una absorbancia en 363.5 nm, correspondiente a la absorción intrínseca de la banda prohibida del ZnO.

Esta investigación destaca el potencial de las plantas nativas como fuentes de compuestos bioactivos para aplicaciones en nanotecnología, al sintetizarse nanopartículas de óxido de zinc mediante un enfoque de síntesis verde, reduciendo el uso de agentes químicos tóxicos, demostrando ser una alternativa sostenible.

Referencias

Acercamiento lo básico César Germán Lizarazo-Salcedo, un, Emir González- Jiménez, E., Yohana Arias-Portela, C., Guarguati-Ariza, J., & Germán Lizarazo-Salcedo, C. (2018). Nanomateriales: un acercamiento a lo básico Nanomaterials: Being Closer to Basics. In Nanomateriales: Artículo especial Med Segur Trab (Internet) (Vol. 64, Issue 251).

Parra, J. (2019). EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD BIOLÓGICA DEL EXTRACTO ETANÓLICO TOTAL (EET) DE FLORES Y HOJAS DE Calea sessiliflora Less. (Tesis de pregrado). Universidad del Cauca.

Degradación fotocatalítica en fase sólida de residuos de poliestireno expandido (EPS) bajo radiación UV

Solid-phase photocatalytic degradation of expanded polystyrene (EPS) waste under UV radiation

Jaramillo-Páez, C.[1], Llanos, Y.[1], Rodríguez, L.F.[1]

[1]Grupo de Investigación en Química Aplicada a Procesos Ecológicos, Universidad del Tolima, Ibagué, Colombia.

cajaramillopa@ut.edu.co

Área Temática: Química de materiales.

Palabras claves: Degradación fotocatalítica, Poliestireno Expandido, Semiconductores, UV.

El poliestireno expandido (EPS) es un polímero de un solo uso, usado ampliamente en la industria dadas sus propiedades físicas, sin embargo, la disposición final de los plásticos ha sido reconocida como un problema ambiental, los procesos avanzados de oxidación se presentan como una alternativa para la degradación de los residuos de EPS.

Los reactivos utilizados para la síntesis de TiO_2 fueron C_3H_8O y $C_{12}H_{28}O_4Ti$, y se utilizó diclorometano como disolvente del EPS y una lámpara Osram ultravitalux de 300 W como fuente de radiación.

La síntesis del TiO_2 se hizo por el método sol-gel, disolviendo isopropóxido de titanio en isopropanol, posteriormente se adicionó agua destilada y se dejó envejecer por 2 horas, el material se secó y calcinó a 650 °C por 2 horas. Se adicionó de Ag sobre la superficie de los semiconductores mediante fotodeposición de $AgNO_3$. Posteriormente se generaron las películas de EPS-semiconductor al disolver el EPS y los semiconductores; estas películas se colocaron en radiación UV durante 312 horas, se hizo seguimiento en la pérdida de peso cada 24 horas.

Los resultados demuestran que las películas irradiadas tienen una pérdida de peso aproximada del 20 %, los análisis de FT-IR permiten identificar el debilitamiento de los picos asociados al anillo de fenil y la aparición de especies oxidadas.

La absorción de la radiación UV por los semiconductores en la superficie del EPS conlleva a la formación de un doble enlace C-C conjugado; el debilitamiento del anillo de fenil demuestra que promueve la oxidación, debido a la generación de pares electrón-hueco; la pérdida de peso sugiere la generación de CO_2 y H_2O procedente de la ruptura de los enlaces en los monómeros del EPS.

Se concluye que la incorporación de nanomateriales en la estructura sólida del EPS promueve la despolimerización de la macromolécula, conllevando a un proceso de fotodegradación, igualmente la adición de iones de Ag disminuye la recombinación de los pares electrón-hueco del semiconductor, presentando altos rendimientos fotocatalíticos.

Referencias

S, D. lal, T, S. J., & C, R. (2019). Solid-phase photodegradation of polystyrene by nano TiO_2 under ultraviolet radiation. *Environmental Nanotechnology, Monitoring and Management*, *12*(March), 100229. https://doi.org/10.1016/j.enmm.2019.100229

Zan, L., Wang, S., Fa, W., Hu, Y., Tian, L., & Deng, K. (2006). Solid-phase photocatalytic degradation of polystyrene with modified nano-TiO_2 catalyst. *Polymer*, *47*(24), 8155–8162. https://doi.org/10.1016/j.polymer.2006.09.023

Estudio cinético de la condensación de Knoevenagel entre la 5-metoxi-1-tetralona y el ácido glioxílico catalizada en medio ácido

Kinetic study of the Knoevenagel condensation between 5-methoxy-1-tetralone and glyoxylic acid catalyzed in acidic medium

Guanoluisa, R.[1,2], Herrera, M.[1,2], Cabrera, E.[1], Stahl, U.[1], Montero, C.[1], Parra, Y.[2,3]

[1]Facultad de Ingeniería Química, Universidad Central del Ecuador, Quito, Ecuador.

[2]Grupo de Investigación en Moléculas y Materiales Funcionales (MoléMater), Quito, Ecuador.

[3]Facultad de Ingeniería en Geología, Minas, Petróleos y Ambiental, Universidad Central del Ecuador, Quito, Ecuador.

rsguanoluisa@uce.edu.ec

Área temática: Química Orgánica.

Palabras clave: estudio cinético, condensación de Knoevenagel, tetralona, catálisis ácida.

Las 1-tetralonas son compuestos de interés que han sido objeto de estudio en diversas investigaciones, bien sea por su presencia en productos naturales como por su síntesis. Esto basado en las propiedades encontradas como: antibióticas, anticancerígenas, antioxidantes, antiarrítmicas, y en tratamientos de enfermedades del sistema nervioso central. Su versatilidad se debe a su elevada reactividad, considerable actividad biológica y bajo costo. En este trabajo se realizó un estudio cinético de la reacción de condensación de Knoevenagel en catálisis ácida (ácido sulfúrico) entre la 5-metoxi-1-tetralona y el ácido glioxílico para obtener el ácido (*E*)-2-(5-metoxi-1-oxo-3,4-dihidronaftalen-2(1*H*)-iliden) acético. La reacción se realizó en un sistema batch (400 rpm, 24 horas) y se evaluó a 75, 80 y 85 °C, obteniendo rendimientos de reacción de 90,30; 93,75 y 94,16 %, respectivamente. El seguimiento de la reacción se realizó mediante técnicas de TLC y HPLC. Para el ajuste cinético, se utilizaron tres métodos matemáticos: integral, diferencial y regresión no lineal. Los resultados mostraron un ajuste apropiado para el modelo cinético con la mínima desviación entre los resultados experimentales y teóricos, junto con altos índices de coeficientes de correlación. Se estableció un modelo cinético de pseudo primer orden con constante cinética *k* de 0,0129; 0,0161; 0,0196 (mL/(mmol*min)); energía de activación de Ea=43,1014 kJ/mol y un factor pre-exponencial de A=8,4608E+03 (mL/(mmol*min)). El producto deseado se caracterizó mediante FTIR, GC-MS y RMN de ^{1}H y ^{13}C. Se concluye que la catálisis ácida es un método de condensación de Knoevenagel eficiente demostrado con el estudio cinético realizado.

Referencias

Poon, P. S., Banerjee, A. K., Vera, W. J., Mora, H. D., Laya, M. S., Bedoya, L., Cabrera, E. V., & Melean, C. E. (2008). Use of 5-methoxy, 6-methoxy and 7-methoxy-α-tetralones in the synthesis of diterpenes, sesquiterpenes and other natural products. Journal of Chemical Research, 4, 181–187. https://doi.org/10.3184/030823408X313699

Sheng, K., Song, Y., Lei, F., Zhao, W., Fan, L., Wu, L., Liu, Y., Wu, S., & Zhang, Y. (2022). Research progress in pharmacological activities and structure-activity relationships of tetralone scaffolds as pharmacophore and fluorescent skeleton. European Journal of Medicinal Chemistry, 227, 113964. https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2021.113964

Síntesis de Agentes Quelantes Derivados de Quinolilpirazolona

Synthesis of Chelating Molecules from Quinolylpyrazolone

Belmar, J., Santana, G.

Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Concepción, Concepción Chile

jbelmar@udec.cl

Área temática: Química Orgánica.

Palabras claves: Pirazolona, tautomerismo, quinolina, síntesis, quelantes.

El heterociclo pirazolona y sus derivados han sido muy estudiados por sus aplicaciones en medicina y en la industria de colorantes. También su uso en la determinación de carbohidratos, la formación de complejos con numerosos cationes metálicos y el fenómeno del tautomerismo. La quinolina también constituye un motivo muy importante en química médica y se encuentra presente en muchos compuestos naturales. Los complejos metálicos son objetos de estudio en búsqueda de aplicaciones médicas. En este contexto surge el interés por sintetizar moléculas que incorporen ambos heterociclos en su estructura y que también posean la capacidad quelante de cationes.

La 4,7-dicloroquinolina es un precursor conveniente para estas síntesis por su bajo costo, fue tratada con hidracina y se obtuvo 7-cloro-4-hidrazinoquinolina (reflujo en etanol, 80% rend.). La condensación de esta hidracina con aceto acetato de etilo (etanol, reflujo, 20% rend.) conduce a 1-(7-cloro-4-quinolin)-3-metil-5-pirazolona, siguiendo el protocolo reportado hace cerca de 50 años, a pesar de los rendimientos muy malos, difícil purificación, caracterizó por RMN de ^{1}H y ^{13}C y por difracción de rayos X. Este compuesto en solución de DMSO y presenta una estructura de 5-hidroxipirazol y de 5-oxopirazol estado sólido. Por otro lado la reacción de la hidracinoquinolina con etoximetilénmalonato de dietilo, etoximetilénmalonodinitrilo y 3-etoxi-2-cianoacrilato de etilo (reflujo en etanol) condujo a los derivados 1-(7-cloro-4-quinolin)-3-metil-5-hidroxipirazol-4-carboxilato de etilo (62%), 1-(7-cloro-4-quinolin)-3-metil-5-hidroxipirazol-4-carbonitrilo (39%) y 1-(7-cloro-4-quinolin)-3-metil-5-aminopirazol-4-carboxilato de etilo (37%) que fueron fácilmente purificables por cristalización y caracterizados por RMN de ^{1}H y ^{13}C. Adicionalmente, la reacción del carbonitrilo con hidroxilamina conduce a una amidoxima (30%). La quinolinopirazolona se obtuvo con mal rendimiento, no se pudo igualar el 50 % reportado. Se debe estudiar alternativas para aumentar el rendimiento y facilitar su purificación. Los datos espectroscópicos y de DRX obtenidos no han sido reportados previamente. Los derivados etoximetilénicos del ácido malónico resultaron ser buenos precursores para obtener nuevas quinolinopirazolonas con estructuras potencialmente quelantes.

Referencias

S. Swaran, A. V. Adhikari, I. H. Chowdhury, N. K. Pal, K. D. Thomas, *Eur. J. Med. Chem.*, 2010, **45**, 3374.

E. Schraufstätter, *Arch. Pharm.*, 1965, **298**, 655.

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Síntesis de Algunas Bisamidas Derivadas de Pirazolona

Synthesis of Some Pyrazolone-derived Bisamides

Belmar, J., Soto, M., Muñoz, F.
Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Concepción, Chile

jbelmar@udec.cl

Área temática: Química Orgánica.
Palabras clave: Pirazolona, tautomerismo, síntesis, bisamidas.

Las carboxamidas constituyen un grupo funcional muy importante en campos como la química médica, de ahí surge el interés por el desarrollo de métodos sintéticos efectivos y que además cumplan con regulaciones ambientales cada vez más exigentes. Las bisamidas son motivos estructurales importantes en moléculas funcionales y también ha sido descrito el uso amidas para extracción de actínidos desde soluciones acuosas. Por otro lado, el heterociclo pirazolona es una estructura relevante en química médica, basta señalar que la dipirona fue el primer analgésico que se comercializó. Además, este heterociclo es atractivo para estudios estructurales debido al tautomerismo que presenta. Con estos antecedentes parece importante explorar rutas sintéticas que incluyan pirazolona y grupos carboxamida en una misma molécula. En este trabajo presenta la síntesis de algunas bis-amidas derivadas de 1-fenil-3-carboxi-5-pirazolona.

La condensación de oxaloacetato de etilo con fenilhidracina (en etanol y reflujo por dos horas) conduce a 3-etoxycarbonil-1-fenil-5-pirazolona, que es hidrolizada al ácido calentando a reflujo con exceso de KOH metanólico. El ácido carboxílico se condensa con algunas diaminas (*m*-feniléndiamina, m-xililéndiamina, etanodiamina, propanodiamina) usando EDC como agente de acoplamiento para obtener las amidas dobles. La misma síntesis usando DCC como agente de acoplamiento ya había sido probada sin éxito. Usar el cloruro de ácido no parece adecuado ya que su síntesis podría traer aparejada la sustitución del carbonilo del heterociclo por un átomo de cloro. Los compuestos obtenidos fueron caracterizados por FTIR y RMN de ^{1}H y ^{13}C. Al analizar los datos espectroscópicos y la estructura de los compuestos debe considerarse que ellos pueden encontrarse en diferentes formas tautoméricas. En este sentido, el análisis de los espectros de RMN de ^{1}H y ^{13}C muestra que el éster presenta una estructura de 5-pirazolona en cloroformo deuterado, en cambio el ácido y las amidas tienen una estructura de 5-hidroxipirazoles en dimetilsulfóxido deuterado.

Se describe la primera síntesis de bisamidas derivadas del ácido 1-fenil-5-oxopirazol-3-carboxílico. Las estructuras fueron confirmadas espectroscópicamente. Es necesario mejorar algunos de los rendimientos en las síntesis y evaluar la obtención de otros productos homólogos.

Referencias

H. Wang, S. Liang, Y. Wang, S. Peng, Y. Liu, B. Sun, H. Tian, N. Li, *J. Mol Struct*., 2022, **1263**, 133184.

K. McCann, B. J. Mincher, N. C. Schmitt, J. C. Braley, *Ind. Eng. Chem. Res*., 2017, **56**, 6515

Optimización de la Actividad Biológica de Péptidos Derivados de la Lactoferrina Bovina: Conjugación con Motivos no Proteicos como Estrategia

Optimizing Biological Activity of Lactoferricin-Derived Peptides: Conjugation with Non-Peptidic Motifs as a Strategy

Daniel Castellar[1], Ricardo Fierro[1], Andrea Barragán[1], Javier García[1], Zuly Rivera [1]
[1]Grupo de Investigación en Síntesis y Aplicación de Moléculas peptídicas, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

rfierrom@unal.edu.co, dcastellara@unal.edu.co

Área temática: Química Orgánica
Palabras clave: **Lactoferricina Bovina, Motivos no proteicos, Síntesis en Fase Sólida (SPPS), HPLC- LC-MS, Extracción en Fase Sólida (SPE).**

En este estudio se determinó el efecto de la incorporación de diferentes moléculas con propiedades específicas como sondas fluorescentes (Rodamina B), AINES (Naproxeno e Ibuprofeno) y derivados del Ferroceno, sobre la actividad citotóxica del péptido anticancerígeno promisorio [1]RWQWRWQWR[9]-NH.

La caracterización por HPLC se realizó empleando un equipo Hitachi Primaide y por LC-MS en un equipo LC-QTOF Bruker IMPACT II. Los medios de cultivo empleados fueron RPMI (Gibco) y DMEM (Sigma). El reactivo para evaluar la viabilidad celular fue el MTT (Sigma).Para la síntesis de los péptidos se empleó SPPS mediante la estrategia Fmoc/Tbtu. Los productos obtenidos fueron purificados empleando SPE. Los puros fueron caracterizados por RP-HPLC y LC-QTOF. La actividad biológica se evaluó mediante el ensayo de viabilidad celular MTT sobre líneas celulares MCF-7 y HeLa. Con los conjugados con moléculas fluorescentes se determinó la colocalización celular empleando microscopía de fluorescencia.

La conjugación con Naproxeno, Ibuprofeno y la sonda fluorescente Rodamina B fueron sintéticamente viables por SPPS. En cuanto la actividad biológica se observó que tanto la Rodamina B como los conjugados con AINES aumentan la citotoxicidad de la secuencia palindrómica en líneas celulares cancerosas tales como las líneas MCF-7 y HeLa exhibiendo IC50 menores a 200 ug/mL. El péptido fluorescente obtenido con Rodamina B exhibe colocalización con las células MCF-7 observadas por microscopía de fluorescencia.

Para el caso de la conjugación con AINES el aumento de la actividad citotóxica en la línea MCF-7 sobre la secuencia original puede explicarse por posibles interacciones con dianas adicionales en la célula que provee el motivo no proteico. Así mismo la conjugación con la sonda fluorescente Rodamina B aumenta la citotoxicidad de la secuencia palindrómica posiblemente debido a su hidrofobicidad. El péptido fluorescente obtenido se colocaliza con las células MCF-7 indicando su potencial como sonda bionálitica para estudios preliminares de mecanismo de acción. La incorporación de AINES y moléculas fluorescentes puede modular positivamente la actividad citotóxica del péptido palíndromo y en el caso de la sonda Rodamina B permite obtener conjugados que no pierden la actividad y son útiles como herramientas bioanalíticas.

Referencias

Barragán-Cárdenas, A., Insuasty-Cepeda, D. S., Niño-Ramírez, V. A., Umaña-Pérez, A., Ochoa-Zarzosa, A., López-Meza, J. E., … & García-Castañeda, J. E. (2020). The nonapeptide RWQWRWQWR: A promising molecule for breast cancer therapy. ChemistrySelect, 5(31), 9691–9700. https://doi.org/10.1002/slct.202001371

Ardila-Chantré, N., Hernández-Cardona, A. K., Pineda-Castañeda, H. M., Estupiñan-Torres, S. M., Leal-Castro, A. L., Fierro-Medina, R., … & García-Castañeda, J. E. (2020). Short peptides conjugated to non-peptidic motifs exhibit antibacterial activity. RSC Advances, 10(49), 29580–29586. https://doi.org/10.1039/d0ra06138k

Auxiliares de Molienda Quirales en la Desimetrización de Oximas Cíclicas Via Reordenamiento de Beckmann

Chiral Grinding Auxiliaries in the Desymmetrization of Cyclic Oximes via Beckmann Rearrangement

Camilo Morales-Manrique[1], Diego Gamba-Sánchez[1]

[1]Laboratorio de Síntesis Orgánica, Bio- y Organocatálisis, Universidad de los Andes, Bogotá,Colombia

oc.morales@uniandes.edu.co

Área Temática: Química Orgánica.

Palabras clave: Mecanoquímica, Síntesis Asimétrica, Reordenamiento de Beckman, Auxiliar de Molienda Quiral-

Una de las áreas con más espacio por explorar en el campo de la mecanoquímica es la síntesis asimétrica. Basándonos en reportes anteriores sobre medios de reacción quirales en reacciones en solución, buscamos implementar auxiliares de molienda quirales como ambientes asimétricos que favorezcan la desimetrización de oximas cíclicas mediante el reordenamiento de Beckmann bajo condiciones mecanoquímicas. Para cumplir este objetivo, inicialmente reprodujimos las condiciones de reacción reportadas por Porcheddu para el reordenamiento de Beckmann a nivel mecanoquímico, en nuestro caso empleando un sustrato cíclico y simétrico, como la 3-fenilciclobutan-1-oxima, en presencia de cloruro *p*-toluensulfonilo y *p*-toluensulfonilimidazol. Afortunadamente, encontramos la formación de 4-fenilpirrolidin-2-ona en un proceso de molienda de 30 minutos utilizando un mini molino Pulverisette 23 de la casa Fritsch.

Buscando mejorar el rendimiento obtenido, realizamos una optimización variando ácidos, agentes activantes, sus relaciones estequiométricas, así como la frecuencia de agitación en el proceso de molienda. Tras identificar las mejores condiciones para este reordenamiento, procederemos a implementar ciclodextrinas, fármacos y moléculas orgánicas sólidas ópticamente activas como auxiliares de molienda procurando favorecer la desimetrización controlada de la posición 4 de la pirrolidinona.

Actualmente, nuestra investigación demuestra que la expansión de una oxima cíclica simétrica de 4 miembros a una lactama de 5 miembros mediante un reordenamiento de Beckmann mecanoquímico es posible bajo condiciones suaves y tiempos cortos de reacción. Además, dada la formación de un estereocentro, estamos explorando activamente el control de su desimetrización haciendo que esta investigación abra nuevas oportunidades para el desarrollo de procesos asimétricos eficientes en la mecanosíntesis.

Referencias

Mocci, R., Colacino, E., Luca, L. De, Fattuoni, C., Porcheddu, A., & Delogu, F. (2021). The Mechanochemical Beckmann Rearrangement: An Eco-e ffi cient " Cut-and-Paste " Strategy to Design the " Good Old Amide Bond ." https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.0c07254

Nagata, Y., Takeda, R., & Suginome, M. (2019). Asymmetric Catalysis in Chiral Solvents: Chirality Transfer with Ampli fi cation of Homochirality through a Helical Macromolecular Sca ff old. 6–11. https://doi.org/10.1021/acscentsci.9b00330

Síntesis de nuevos híbridos quinolina-chalcona como posibles agentes antioxidantes e inhibidores de oxígeno singlete

Synthesis of new quinoline-chalcone hybrids as possible antioxidant agents and oxygen singlet inhibitors

Romero, A.[1], Capacho, W.[1]

[1]Grupo de investigación en compuestos Orgánicos de interés medicinal, CODEIM, Universidad industrial de Santander, Santander, Colombia.

arafrom@uis.edu.co

Área Temática: Química Orgánica.

Palabras clave: Híbridos moleculares, actividad antioxidante, reacción de Povarov, quinolina-chalcona, reacción de Claisen-Schmidt.

El crecimiento científico en el desarrollo de nuevas mitologías de síntesis ha permitido el acceso a nuevos compuestos sintéticos, de los cuales se pueden aprovechar sus propiedades bioactivas y fisicoquímicas. Es así, que se ha encontrado ampliamente en la literatura la hibridación molecular como estrategia sintética para la construcción de nuevos compuestos con propiedades mejoradas y más selectivas. Esto conduce al interés por encontrar nuevas moléculas con propiedades doble propósito, donde se pueden aprovechar diferentes características que presentan cada uno de los fragmentos que conforman el híbrido. Por tal razón, se pretendió construir compuestos híbridos que contuvieran en su andamiaje molecular dos farmacóforos con estudiadas propiedades bioactivas, como lo son las quinolinas y las chalconas. Esto con la finalidad de encontrar nuevos compuestos, con propiedades antioxidantes que pudieran lidiar con especies reactivas de oxígeno, las cuales pueden ser generadas por estrés celular a partir de enfermedades, agentes del entorno e inclusive tratamientos médicos. Además, con la posibilidad de estudiar la capacidad de los híbridos sintetizados como agentes capaces de combatir alguna otra patología.

Para la obtención de los híbridos quinolina-chalcona propuestos, se implementaron sustancias de partida sencillas de baja masa molecular, como *p*-aminoacetofenona, tres isómeros de pirinacarbozaldehído y aldehídos aromáticos *para*-sustituidos. Por otra parte, la metodología se dividió en tres fases; en la primera se implementó la reacción de Povarov, donde se usó ácido *p*-toluenosulfónico como catalizador, además de hacer un paralelismo con reacciones que involucran radiación de microondas. Posteriormente, los compuestos formados fueron aromatizados mediante una reacción clásica con azufre fundido. Finalmente, las chalconas de interés fueron obtenidas mediante una reacción de condensación de Claisen-Schmidt.

Ahora bien, el uso de reacciones asistidas por microondas mostró mejoras en cuanto a rendimientos, tiempos de reacción, eficiencia y poca formación de subproductos. Con todo lo anterior, los híbridos de interés se pudieron obtener con rendimientos entre 60 % y 90 %, lo que mostró que la metodología implementada es viable y eficiente, además de implementar precursores sencillos y reacciones de fácil acceso. Estos compuestos finales fueron aislados y enviados a pruebas preliminares que describieran su capacidad antioxidante y actividad citotóxica en células.

Referencias

Cardona-G, Wilson, A. F. Yepes, & Herrera-R, A. (2018). Hybrid molecules: Promising compounds for the development of new treatments against leishmaniasis and Chagas disease. *Current Medicinal Chemistry, 25*(30), 3637–3679.

Carvajal, C. (2019). Reactive oxygen species: Formation, function, and oxidative stress. *Medicina Legal de Costa Rica, 36(*1), 91–100.

Síntesis y caracterización de 3-[(5-amino-1,3-dimetil-1*H*-pirazol-4-il)(4-metoxifenil)metil]-4-hidroxicumarina .

Synthesis and characterization of 3-[(5-amino-1,3-dimethyl-1*H*-pyrazol-4-yl)(4-methoxyphenyl)methy]-4-hydroxycoumarin

Carlos S. Ulloa Chacha [1], **Lorena Meneses Olmedo**[1], **Jorge Heredia-Moya**[2]

[1]Escuela de Ciencias Químicas, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Pontificia Universidad Católica del Ecuador, Av. 12 de Octubre 1076 y Roca, Quito, Ecuador

[2] Centro de Investigación Biomédica (CENBIO), Facultad de Ciencias de la Salud Eugenio Espejo, Universidad UTE, Quito 170527, Ecuador

csulloa@puce.edu.ec

Área Temática: Química Orgánica.

Palabras clave: Síntesis de heterociclos, pirazolocumarina., reacción multicomponente.

El pirazol y la cumarina son estructuras heterocíclicas que han ganado gran importancia en la química medicinal debido a su versatilidad y amplio espectro de actividades biológicas. Tal es así que estos compuestos se encuentran presentes en los principios activos de diversos fármacos disponibles actualmente en el mercado. Muchos compuestos heterocíclicos han sido sintetizados mediante reacciones multicomponentes que involucran 5-aminopirazoles, compuestos cíclicos con hidrógenos activos y diferentes benzaldehídos sustituidos. Utilizando 4-hidroxicumarina como compuesto con hidrógenos activos, se han logrado sintetizar pirazolopiridocumarinas tetracíclicas con muy buenos rendimientos. Aunque se ha propuesto que una 3-[(5-aminopirazol-4-il)(aril)metil]-4-hidroxicumarina actúa como intermediario en la formación de estos heterociclos, aún no hay reportes de que se haya aislado este compuesto. Las 3-[(5-aminopirazol-4-il)(aril)metil]-4-hidroxicumarinas ofrecen nuevas oportunidades sintéticas debido a la presencia del enol y un grupo amino libre, lo que permite la creación de nuevos compuestos con potencial bioactividad. Para sintetizar este intermediario, se probaron diferentes condiciones de reacción, usando como modelo la reacción entre *p*-anisaldehído, 4-hidroxicumarina y 5-amino-1,3-dimetilpirazol. En este trabajo se reporta los resultados obtenidos hasta el momento de la síntesis y caracterización de 3-[(5-amino-1,3-dimetil-1*H*-pirazol-4-il)(4-metoxifenil)metil]-4-hidroxicumarina, la cual se obtuvo con buenos rendimientos mediante sonicación de los productos de partida a 50 °C en etanol acuoso y usando TFA como catalizador. No obstante, se observó la formación de biscumarina como producto secundario en todas las reacciones. Actualmente se está investigando el efecto del solvente en la reacción y sintetizando varios derivados para posteriormente evaluar su actividad biológica. En conclusión, se logró sintetizar 3-[(5-amino-1,3-dimetil-1*H*-pirazol-4-il)(4-metoxifenil)metil]-4-hidroxicumarina con buenos rendimientos.

Referencias

Liu, M., Yin, G., Zhu, C., & Yao, C. (2016). Selective Synthesis of New Tetracyclic Coumarin-fused Pyrazolo[3,4-b]pyridines and Pyrazolo[3,4-b]pyridin-6(7H)-ones. *Journal of Heterocyclic Chemistry*, *53*(5), 1617–1625. https://doi.org/10.1002/JHET.2473

Shaabani, A., Nazeri, M. T., & Afshari, R. (2019). 5-Amino-pyrazoles: potent reagents in organic and medicinal synthesis. In *Molecular Diversity* (Vol. 23, Issue 3, pp. 751–807). Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/s11030-018-9902-8

Síntesis de derivados de curcumina con potencial neuroprotector

Roni A. Fernández[1,2*], Andrés Vlieg-Wong[1,2], Rugyel Reyes[1], Johant Lakey-Beitia[1,3]

[1]Centro de Centro de Biodiversidad y Descubrimiento de Drogas, Instituto de Investigaciones Científicas y Servicios de Alta Tecnología (INDICASAT-AIP), Ciudad del Saber, Ciudad de Panamá, República de Panamá.

[2]Escuela de Química, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Universidad de Panamá, Transístmica, Ciudad de Panamá, República de Panamá.

[3]Sistema Nacional de Investigación (SNI), SENACYT, Panamá City 0816-02852, Panamá.

roni.andy611@gmail.com

Área Temática: Química Orgánica.

Palabras clave: Curcumina, Derivados Sintéticos, Succinatos, Ésteres de curcumina, Enfermedad de Alzheimer.

La curcumina es una molécula pleiotrópica por sus múltiples propiedades terapéuticas, entre ellas, antioxidante, antiagregante, antiinflamatoria y anticancerígena. No obstante, este polifenol tiene la desventaja de sufrir transformaciones antes de ser absorbido por el organismo, perdiendo su actividad biológica. Es por ello que, a través de la síntesis orgánica, se busca modificar su estructura para proteger la región fenólica y ceto-enólica de esta molécula, para así ver si estos cambios estructurales potencian su actividad.

Nuestro grupo de investigación busca consolidar el área de síntesis orgánica, es por ello que se han sintetizado a gran escala (≥ 1g) derivados de curcumina. La modificación química es realizada en dos pasos: la síntesis del ligando y luego la esterificación de la curcumina.

La síntesis del ligando se realiza por medio de la reacción de succinilación, haciendo reaccionar un alcohol de interés y el anhídrido succínico. Es decir, en un vial en atmósfera inerte se combinan un alcohol de interés, la base y el disolvente en constante agitación por espacio de 30 min. Luego, se adiciona el anhídrido succínico. Después de una constante agitación por espacio de 48 h, se procede a purificar y caracterizar el succinato (ligando) sintetizado. Los succinatos son sintetizados como protectores y potenciadores de la actividad biológica de la curcumina. El paso 2 es la síntesis del éster de curcumina, por la reacción de Steglich, donde la curcumina interacciona con el ácido succínico para formar el éster de interés. Es decir, en atmósfera inerte de argón, se hizo reaccionar el ácido succínico (ligando), la base y la curcumina en disolvente por espacio de 15 min. Luego, se añadió el activador y se dejó agitar por 24 h a temperatura ambiente. Se procedió a purificar y a caracterizar estos compuestos de interés. Diez derivados de curcumina fueron sintetizados a gran escala gracias a su potencial neuroprotector frente a la enfermedad de Alzheimer. Con esta síntesis a gran escala (≥ 1 g) se busca mostrar que se puede escalar este tipo de compuesto.

Referencias

Lakey-Beitia, J.; Berrocal, R.; Rao, K.S.; Durant, A.A. Polyphenols as Therapeutic Molecules in Alzheimer's Disease Through Modulating Amyloid Pathways. *Mol. Neurobiol.* **2015**, *51*, 466–479.

Lakey-Beitia, J.; Gonzalez, Y.; Doens, D.; Stephens, D.E.; Santamaria, R.; Murillo, E.; Rao, K.S.; Larionov, O. V; Durant-Archibold, A.A. Assessment of Novel Curcumin Derivatives for the Prevention of the Inflammatory Process in Alzheimer's Disease. *J Alzheimer's Dis* **2017**, *2017*.

González, Y.; Mojica-Flores, R.; Moreno-Labrador, D.; Cubilla-Rios, L.; Rao, K.S.J.; Fernández, P.L.; Larionov, O. V.; Lakey-Beitia, J. Polyphenols with Anti-Inflammatory Properties: Synthesis and Biological Activity of Novel Curcumin Derivatives. *Int. J. Mol. Sci.* **2023**, *24*, 3691.

Lakey-Beitia, J.; Gonzalez, Y.; Doens, D.; Stephens, D.E.; Santamaria, R.; Murillo, E.; Gutierrez, M.; Fernandez, P.L.; K.S.Rao; Larionov, O. V.; et al. Assessment of Novel Curcumin Derivatives as Potent Inhibitors of Inflammation and Amyloid-Beta Aggregation in Alzheimer Disease. *J Alzheimers Dis* **2017**, *2017*, 1–10.

González-Albadalejo, J.; Sanz, D.; Claramunt, R.M.; Lavandera, J.L.; Alkorta, I.; Elguero, J. Curcumin and curcuminoids: Chemistry, structural studies and biological properties. *An. la Real Acad. Nac. Farm.* **2015**, *81*.

Estudios De La Relación Cuantitativa Actividad-Estructura (Qsar) De Análogos De Flavonoides Con Potencial Actividad Biológica Contra La Línea Celular Mcf-7

Studies Of The Quantitative Activity-Structure Relationship (Qsar) Of Flavonoid Analogs With Potential Biological Activity Against The Mcf-7 Cell Line

Rodríguez, O.[1] Trilleras, J.[1]

[1]Grupo de investigación en compuestos Heterocíclicos, Universidad del Atlántico, Puerto Colombia, Colombia.

omarrodriguez@mail.uniatlantico.edu.co

Área temática: Química Orgánica

Palabras Clave: Actividad anticancerígena, Flavonas, Quinolona, Quinolina, Cribado virtual.

Los metabolitos naturales, entre ellos los flavonoides, polifenoles de origen vegetal, entre los cuales encontramos: flavones, flavanonoles, flavanoles, flavanonas, isoflavonas; llaman la atención como estructuras promisorias para el diseño de nuevos fármacos por demostrarse que estas poseen actividad como agentes tratantes de varias líneas de cáncer, entre las cuales se destacan: U87MG, T98, MCF-7, MDA-MB-231 , A-549, NCI-H460, C4-2-IRR, 22Rv1, CT116 y SW620.

En nuestro estudio buscamos el diseño de derivados de híbridos que combinen el núcleo 4-oxo—benzopirano con comprobada actividad anticancerígena; con bloques quinolínicos, uno de los bloques más versátiles, sobre el cual recae la atención por ser capaz de interferir con objetivos emergentes involucrados en la progresión del cáncer. Para lograr este cometido se ha construido un dataset de 203 compuestos que contienen como bloque común flavonas con actividad anticancerígena contra la línea celular MCF-7 reportada bajo el parámetro IC_{50} con el fin de realizar el diseño de compuestos.

Después del análisis conformacional y optimización se determinaron los descriptores y con ello la búsqueda de modelos. Los parámetros que se consideraron para asegurar la no colinealidad fueron: R^2, Coeficiente de Pearson y análisis de varianza (ANOVA). Se consideró la relación lineal cuando el coeficiente de regresión, r era mayor a 0,80.

Establecida la robustez y calidad predictiva externa de los modelos construidos, se realizó la predicción de la actividad biológica de compuestos derivados aún no sintetizados,

De acuerdo con los parámetros estadísticos arrojados se determina que el modelo cumple con los requisitos mínimos de calidad estadística para predecir la actividad biológica de nuevos derivados.

Referencias

Tropsha, A. (2010). Best practices for QSAR model development, validation, and exploitation. In Molecular Informatics (Vol. 29, Issues 6–7, pp. 476–488). Wiley-VCH Verlag. https://doi.org/10.1002/minf.201000061

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Síntesis de derivados de benzotriazol, evaluación de sus propiedades fotofísicas y potencial aplicación en la generación de bioimágenes y OLED

Synthesis and evaluation of photophysical properties of benzotriazole derivatives and their potential application in cell imaging and OLEDs

Hernández-Fernández, E.[1], Aztatzi-Mendoza, M. A.[1], Ortega-Villarreal, A. S.[1], López, I.[1], López-Cortina, S. T. [1], Michaelis, D.[2]

[1]Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Av. Universidad s/n, Ciudad Universitaria, San Nicolás de los Garza, Nuevo León 66455, México.

[2]Department of Chemistry and Biochemistry, Brigham Young University, Provo, UT 84602, United States.

eugenio.hernandezfr@uanl.edu.mx

Área Temática: Química Orgánica.

Palabras clave: Benzotriazol, microondas, fluorescencia, solvatocromismo, OLED.

La síntesis de compuestos orgánicos sigue siendo hoy en día una de las herramientas más utilizadas para la preparación de nuevos compuestos con aplicaciones diversas. Dentro de los compuestos orgánicos existen ciertas estructuras privilegiadas que cumplen bien para ciertos propósitos; por ejemplo, el anillo de benzotriazol se encuentra formando parte de compuestos con aplicaciones tanto químicas como biológicas. Por lo tanto, en el presente trabajo mostramos la síntesis de una serie de derivados de benzotriazol luminiscentes con aplicación en la generación de bioimágenes y como capa emisora en OLED.

Los derivados de benzotriazolil acrilato de etilo [2*H*-benzotriazolil-3-(4-dimetilamino)fenil acrilato de etilo **1a** y 2*H*-benzotriazolil-3-(4-dietilamino)fenil acrilato de etilo **1b**] fueron sintetizados mediante condensación de Knoevenagel haciendo reaccionar el 2*H*-benzotriazolil acetato de etilo con los aldehídos aromáticos correspondientes. La reacción procedió bajo condiciones de reflujo por 6 h, utilizando piperidina como base y etanol como disolvente, obteniendo los compuestos con rendimientos moderados, de 87% y 72% respectivamente. Posteriormente, ambos fueron utilizados como precursores para la síntesis de derivados de benzotriazolil vinil anilina (2*H*-benzotriazolilvinil-*N*,*N*-dimetilanilina **2a** y 2*H*-benzotriazolilvinil-*N*,*N*-dietilanilina **2b**) vía descarboxilación de Krapcho bajo condiciones de reflujo en DMSO, H_2O y NaCl. Los compuestos fueron obtenidos con rendimientos de 47% y 43%, respectivamente. Todos los derivados fueron caracterizados estructuralmente mediante FT-IR, RMN y HRMS.

Por otro lado, la evaluación fotofísica de los derivados **1a-b** y **2a-b** mediante las espectroscopías de UV-Vis y fluorescencia demostró el carácter luminiscente de estos, registrando fuertes bandas de absorción (391 – 402 nm) y emisión (463 – 571 nm), valores de desplazamientos de Stokes de 64 – 177 nm y altos coeficientes de absortividad molar (2.40 – 3.82 x10^4 $M^{-1}cm^{-1}$) en metanol. Los derivados **1a-b** presentaron propiedades adecuadas para ser utilizados como tintes en la generación de bioimágenes, demostrando su capacidad para teñir lisosomas. Además, las benzotriazolil vinil anilinas **2a-b** se sometieron a un estudio con catorce disolventes orgánicos, encontrando que estas exhiben un solvatocromismo positivo. Asimismo, se determinaron las propiedades electroquímicas de ambos compuestos como películas delgadas mediante voltamperometría cíclica, demostrando que estos compuestos pueden ser utilizados como capa emisora para la construcción de OLED.

Referencias

Ortega-Villarreal, A. S., Hernández-Fernández, E., Jensen, C., Valdivia-Berroeta, G. A., Garrard, S., López, I., Smith, S. J., Christensen, K. A., Reyes-González, M. A., & Michaelis, D. J. (2019). Synthesis and characterization of ethyl benzotriazolyl acrylate-based D-π-A fluorophores for live cell-based imaging applications. *RSC Advances*, 9(16), 8759–8767. https://doi.org/10.1039/c9ra00108e

Aztatzi-Mendoza, M. A., Ortega-Villarreal, A. S., López, I., Espinosa Roa, A., López-Cortina, S., Bernal, W., Maldonado, J. L., Valdivia-Berroeta, G. A., Smith, S. J., & Michaelis, D. J. (2024). Synthesis, characterization, optical properties, and solvatochromism of highly fluorescent benzotriazolyl vinyl aniline based D-π-A fluorophores. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 449, 115400. https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2023.115400

Diseño y síntesis de un nuevo híbrido imidazol-3,4-dihidropirimidin-2(1*H*)-tiona

Design and synthesis of new imidazole-3,4-dihydropyrimidin-2(1*H*)-thione hybrid

Montañez, J.D[1], Pinzón, J.R.[1], Kouznetsov, V.V.[1]

[1]Laboratorio de Química Orgánica y Biomolecular, Escuela de Química, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.

johndm07@gmail.com

Área Temática: Química Orgánica.

Palabras clave: híbridos, metronidazol, monastrol, imidazoles, 3,4-dihidropirimidin-2(1*H*)-tionas, reacción de Biginelli.

Los imidazoles y las dihidropirimidin-onas (DHPMs) son dos clases importantes de los heterociclos debido a su amplia gama de bioactividades y aplicaciones en el campo del descubrimiento de fármacos. Los representantes significativos en estas clases son el Monastrol (MNT) y el Metronidazol (MTZ), agentes antitumorales y antiparasitarios efectivos, respectivamente. Sin embargo, ambos presentan también efectos secundarios considerables y problemas de toxicidad. Por tanto, para optimizar y mejorar las características de los agentes se utiliza la estrategia de la hibridación molecular.

La isovainillina, tiourea y acetoacetato de etilo (AE) que fueron utilizados en la reacción de Biginelli y el cloruro de 4-toluensulfonilo (TsCl) son comerciales. El fármaco MTZ, usado en la síntesis del precursor clave, 1-[2-(tosiloxi)etil]-2-metil-5-nitroimidazol (MTZ-OTs), es obtenido de pastillas comerciales trituradas.

El MTZ-OTs fue obtenido vía la tosilación del grupo OH de MTZ. Después, este y la isovainillina se reaccionaron para preparar isovainillina O-sustituida con el correspondiente fragmento de MTZ (*N*-(Ar-oxietil)-MTZ). Este último se usó en la reacción de Biginelli con tiourea y AE en presencia de un catalizador ácido que permitió preparar un nuevo producto híbrido imidazol-3,4-dihidropirimidin-tiona, MTZ-MNT.

El *N*-(Ar-oxietil)-MTZ se obtuvo vía la sustitución nucleofílica S_N2 con un rendimiento del 35% como un sólido de color amarillo. Este precursor, tiourea y AE se utilizó en la posterior condensación de Biginelli catalizada por ácido cítrico, obteniéndose la nueva molécula híbrida del esqueleto de MNT con un buen rendimiento y con apariencia de sólido blanco.

La construcción de nuevos híbridos MTZ-MNT usando la reacción de Biginelli implica un avance en el desarrollo de nuevos profármacos antitumorales y antiparasitarios que pueden ser útiles en los estudios farmacológicos posteriores.

La metodología desarrollada demuestra la versatilidad de la reacción de Biginelli empleando nuevos sustratos como isovainillina O-sustituida y la utilidad del diseño molecular en la obtención de nuevas moléculas híbridas MTZ-MNT biológicamente activas.

Referencias

Soni, J., Sethiya, A., Agarwal, S. (2022). Imidazole and its derivatives: Introduction and synthetic aspects. En: "Imidazole-Based Drug Discovery", edited by Agarwal, S., Elsevier Inc., Amsterdam, Netherlands, pp. 1–34. https://doi.org/10.1016/b978-0-323-85479-5.00003-4

Kaur, R., Chaudhary, S., Kumar, K., Gupta, M. K., Rawal, R. K. (2017). Recent synthetic and medicinal perspectives of dihydropyrimidinones: A review. European Journal of Medicinal Chemistry, 132, 108–134. doi:10.1016/j.ejmech.2017.03.025

Preparación de 2,3-diaril-2,3-dihidroquinazolin-4(1*H*)-onas, quinazolin-4(3*H*)-onas y su conversión a quino[2,1-*b*]quinazolin-12-onas. ¿Cuáles derivados se deberían preparar? Caso de estudio empleando un mapa auto-organizados de Kohonen basado en parámetros de Lipinski

Preparation of 2,3-diaryl-2,3-dihydroquinazolin-4(1*H*)-ones, quinazolin-4(3*H*)-ones and their conversion to quino[2,1-*b*]quinazolin-12-ones. Which derivatives should be prepared? Case study using a self-organized Kohonen map based on Lipinski parameters

Ortiz, N[1] , Quijano, C.[2] , Urbina, J-M.[1]

[1]Laboratorio de Química Orgánica y Biomolecular (LQOBio), Escuela de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Industrial de Santander, Carrera 27 Calle 9, Bucaramanga, Colombia.

[2]Centro de Investigaciones en Catálisis (CICAT), Vicerrectoría de Investigaciones, Universidad Industrial de Santander, Sede Guatiguará, Piedecuesta, Colombia.

nicole2183081@correo.uis.edu.co

Área Temática: Química Orgánica.

Palabras clave: 2,3-dihidroquinazolin-4(1*H*)-ona, quinazolin-4(3*H*)-ona, quino[2,1-*b*]quinazolin-12-ona, parámetros de Lipinski, mapa auto-organizado de Kohonen.

La preparación de librerías de compuestos empleando estrategias DOS (Diversed Oriented Synthesis) se ha orientado hacia la búsqueda de sustancias biológicamente activas empleando las estrategias TOS (Target Oriented Synthesis) y BiOS (Biology Oriented Synthesis). La reacción multicomponente (MCR), catalizada por diversos ácidos, entre el anhídrido isatóico con distintas anilinas y benzaldehídos (cinamaldehído), permite la preparación de diversas 2,3-diaril-2,3-dihidroquinazolin-4(1*H*)-onas. La variabilidad de productos depende de los diferentes sustituyentes sobre los anillos aromáticos de la anilina y del aldehído.

Al analizar el espacio químico asociado a las 2,3-diaril-2,3-dihidroquinazolin-4(1*H*)-onas diversamente sustituidas, se observa que el número de derivados a preparar, sin emplear un sistema combinatorio, supera las posibilidades para el desarrollo de un trabajo de investigación a nivel de pregrado. Del este gran número de derivados, ¿cuáles deberían prepararse y cómo se justifica su preparación? ¿Es posible adelantar la justificación de la preparación de los derivados analizando sus descriptores de Lipinski? ¿Se puede justificar también la preparación de determinados derivados tetracíclicos de la quino[2,1-*b*]quinazolin-12-onas siguiendo la misma comparación? Estas preguntas fueron la base para el desarrollo del estudio que se presenta a continuación.

Empleando la herramienta quimioinformática RDKit y estructuras SMILE, se calcularon diversos descriptores asociados a la regla de Lipinski et al., 2012 para determinar la relación entre estos y su clasificación “drug-like”.

Se encontraron los principales parámetros para un conjunto de 375 moléculas derivadas del núcleo de las 2,3-diaril-2,3-dihidroquinazolin-4(1*H*)-onas y sus respectivos productos tetracíclicos quino[2,1-*b*]quinazolin-12-onas, resultantes de la reacción de alquilación intramolecular de Friedel-Crafts para aquellos derivados con cinamaldehído. A partir de la organización de los parámetros obtenidos se generó una matriz de datos de 375x8. La organización de las moléculas con los mejores parámetros, cuantificados con base en el trabajo de Bickerton et al., 2012, se facilitó mediante *“Kohonen Self-Organizing Map in Python & NumPy”*, visualizando una matriz de hexágonos de 10x10. De la clasificación encontrada se seleccionaron aquellas moléculas que cumplen con los mejores parámetros, justificando de manera cuantitativa su síntesis, reduciendo así el número de compuestos a preparar en el laboratorio.

Referencias

Bickerton, G. R., Paolini, G. V., Besnard, J., Muresan, S., & Hopkins, A. L. (2012). Quantifying the chemical beauty of drugs. *Nature Chemistry*, *4*(2), Article 2. https://doi.org/10.1038/nchem.1243

Lipinski, C. A., Lombardo, F., Dominy, B. W., & Feeney, P. J. (2012). Experimental and computational approaches to estimate solubility and permeability in drug discovery and development settings. *Advanced Drug Delivery Reviews*, *64*, 4-17. https://doi.org/10.1016/j.addr.2012.09.019

Aislamiento y caracterización de metabolitos secundarios del hongo endófito *Lasiodiplodia iranensis* F0619

Isolation and characterization of secondary metabolites from the endophytic fungus *Lasiodiplodia iranensis* F0619

Aparicio, T.M.[1], Torres-Mendoza, D.[1,2,3], Cubilla-Rios, L.[1,2]
[1]Laboratorio de Bioorgánica Tropical, Universidad de Panamá, Panamá
[2]Departamento de Química Orgánica, Universidad de Panamá, Panamá
[3]Vicerrectoría de Investigación y Postgrado, Universidad de Panamá, Panamá

aparicio0220@hotmail.com

Área Temática: Química Orgánica.
Palabras clave: Lasiodiplodia iranensis, hongo endófito, metabolitos secundarios.

Los hongos endófitos son microorganismos que viven dentro de los tejidos de un organismo huésped, sin causarle algún daño o enfermedad. En los últimos años han llamado la atención debido a su habilidad para aumentar el crecimiento y desarrollo del huésped fortaleciendo su respuesta a factores bióticos y abióticos. Estos hongos han demostrado tener el potencial para producir compuestos químicos novedosos, con una variedad de actividades biológicas relevantes en aplicaciones en medicina, farmacéutica y agrícolas. La complejidad de la obtención, purificación y caracterización de metabolitos secundarios va a depender del tipo de extracto y el tipo de hongo. En esta investigación, se utilizó el hongo endófito *Lasiodiplodia iranensis* F0619, una especie muy poco estudiada en relación con sus metabolitos secundarios. El hongo se cultivó en extracto de malta-agar durante 15 días, con iluminación constante a 26 °C; Luego de este período, la biomasa resultante se transfirió a bolsas herméticas y se congelaron a -80 °C por 24 h y luego se liofilizaron. Esta biomasa liofilizada se extrajo en un gradiente de hexano, acetato de etilo y metanol respectivamente. La fracción de metanol se sometió a un fraccionamiento mediante extracción en fase sólida de fase reversa. Las fracciones resultantes se analizaron mediante cromatografía en capa fina y espectrometría de masas por electro pulverización. El análisis preliminar de fragmentación masa-masa sugiere la presencia de compuestos tipo lactona que ya han sido reportados previamente en el género *Lasiodiplodia* .

Referencias

Manganyi, M.C., Ateba, C.N., Untapped Potentials of Endophytic Fungi: A Review of Novel Bioactive Compounds with Biological Applications. *Microorganisms*, **2020**, *8*, 1934, doi: 10.3390/microorganisms8121934

Salvatore, M.M., Alves, A., Andolfi, A., Secondary Metabolites of *Lasiodiplodia theobromae*: Distribution, Chemical Diversity, Bioactivity and Implications of Their Occurrence. *Toxins*, **2020**, *12*, 29, doi: 10.3390/metabo13080912

Perfil químico de muestras de café de la variedad geisha determinados mediante UPLC-MS/MS

Chemical Profile of Geisha variety coffee samples by UPLC-MS/MS

Castillo-Gonzalez, R.[1], Torres-Mendoza, D.[1,2,3], Cubilla-Ríos, L.[1,2]
[1]Laboratorio de Bioorgánica tropical, Universidad de Panamá, Panamá
[2]Departamento de Química Orgánica, Universidad de Panamá, Panamá
[3]Vicerrectoría de Investigación y Postgrado, Universidad de Panamá, Panamá.

rigobertodaniel17@gmail.com

Área temática: Química Orgánica.
Palabras claves: perfil químico, café Geisha, UPLC-MS/MS.

El café es un producto de consumo global y uno de los cultivos comerciales más importantes; destaca por sus características organolépticas, teniendo a Brasil, Vietnam y Colombia como los lideres en su producción mundial. En Panamá, el cultivo de café también es crucial para la economía y la nutrición; promover su producción y consumo responsable es vital para la sostenibilidad del sector, alineándose con el ODS 12 de la ONU. Una gestión sostenible y eficiente de los recursos naturales es fundamental para mantener la producción futura del café. En esta investigación se procura determinar el perfil químico de muestras de *Coffea arabica* var. Geisha C. y establecer su dependencia con el microclima. Se adquirieron muestras de café de fincas productoras en Chiriquí. Se prepararon extractos y se analizaron en un cromatógrafo líquido de fase reversa de ultra alta eficiencia acoplado a un espectrómetro de masas (UPLC-MS/MS) con una fuente de ionización por electropulverización. El proyecto se dividió en dos etapas: en la primera, se adaptó la metodología existente para los análisis, asegurando que los procedimientos fueran adecuados para las muestras. En la segunda, se realizó el análisis de los extractos obtenidos, identificando y cuantificando los compuestos presentes. Los resultados mostraron perfiles químicos similares en las muestras, pero con variaciones en algunos picos de baja absorción, indicando que el microclima afecta la formación de metabolitos secundarios, enriqueciendo el sabor y el valor económico del café en Boquete.

Referencias

Pérez-Míguez, R., Castro-Puyana, M., Sánchez-López, E., Plaza, M., & Marina, M. L. (2020). Untargeted HILIC-MS-Based Metabolomics Approach to Evaluate Coffee Roasting Process: Contributing to an Integrated Metabolomics Multiplatform. *Molecules*, 25, (4), 887, doi: 10.3390/molecules25040887

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Híbridos de quinolina-benzotiazol como nuevos luminógenos AIE y quimiosensores fluorescentes eficientes para iones de cianuro

Quinoline-benzothiazole hybrids as new AIE luminogens and efficient fluorescent chemosensors for cyanide ions

Illicachi, L.[1], Ayala, M.[2] Trilleras, J.[2] D'vries, R.[3] Insuasty, A.[4] Abonia, R.[4] Quiroga, J.[4] Insuasty, D.[5]

[1]Grupo de Investigación en Química y Biotecnología, Universidad Santiago de Cali, Cali, Colombia.

[2]Grupo de Investigación en Compuestos Heterocíclicos, Universidad del Atlántico, Puerto Colombia, Colombia

[3]Grupo de Investigación en Química de Productos Naturales, Universidad del Cauca, Popayán, Colombia.

[4]Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos, Universidad del Valle, Cali, Colombia.

[5]Departamento de Química y Biología, Universidad del Norte, Puerto Colombia, Colombia.

luis.illicachi00@usc.edu.co

Área Temática: Química Orgánica.

Palabras clave: Quinolina, Benzotiazol, Quimiosensores, Cianuro, Síntesis Orgánica.

Los aniones desempeñan papeles clave en los procesos químicos y biológicos y han sido muy estudiados en diversas áreas como las ciencias de la vida, la química, la medicina, la catálisis y las ciencias medioambientales. En este sentido, el reconocimiento de aniones específicos, principalmente los considerados peligrosos, se ha convertido en una tarea esencial entre los investigadores. En particular, el reconocimiento de cianuro (CN^-), es bastante importante ya que una descarga no deseada de este anión en la naturaleza puede resultar no sólo en un riesgo ambiental significativo, sino que también se considera muy perjudicial para los seres humanos, incluso a una dosis de sólo 0,5 mg por kilogramo de peso corporal. Los quimiosensores fluorescentes son cada vez más atractivos debido a su notable selectividad, versatilidad, bajo coste, preparación de muestras menos compleja y tiempos de reacción rápidos que permiten la detección en tiempo real. Todas estas características los convierten en buenos candidatos como alternativa a otras técnicas analíticas utilizadas para la detección de iones cianuro, como la electroquímica, la polarografía y la cromatografía de gases.

Este trabajo describe la síntesis y caracterización de 3 nuevos híbridos de quinolina-benzotiazol, el estudio de sus propiedades de emisión inducida por agregación (AIE) y el uso de estos sistemas como sondas fluorescentes eficientes para iones cianuro. Los derivados conjugados unidos a través de un doble enlace favorecen la comunicación electrónica y su geometría planar, demostrada por difracción de rayos X en monocristal, evidencian que pueden agregarse fuertemente bajo ambientes solvofóbicos, dando lugar a agregación y exhibiendo un comportamiento AIE significativo. Además, el doble enlace entre las unidades electroactivas es propenso a reacciones de adición nucleofílica por iones cianuro, de forma selectiva, llevando a desactivar las propiedades de fluorescencia, haciendo de este sistema híbrido una sonda eficiente para iones cianuro mostrando una notable selectividad con límites de detección entre 0.29 y 0.44 μM.

Referencias

Davis, J. T., Gale, P. A. & Quesada, R. (2020). Advances in anion transport and supramolecular medicinal chemistry. Chemical Society Reviews, 49(16), 6056–6086. https://doi.org/10.1039/C9CS00662A

Peng, T., Li, S., Zhou, Y., Liu, R. & Qu, J. (2021). Two cyanoethylene-based fluorescence probes for highly efficient cyanide detection and practical applications in drinking water and living cells. Talanta, 234, 122615. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.talanta.2021.122615

Frutales silvestres infrautilizados de la Región Pacífica colombiana: estudio del contenido de fenoles y la capacidad antioxidante

Low used wild fruits from the colombian Pacific Region: study of phenolic contents and antioxidant capacity

Sánchez-León, Ana M.[1*], Cedeño-Fierro, Valeria[1], González-Mina, Robert[1], Mendiola, Jose A.[2], Torres-Castañeda, Harlen[1]

[1]Grupo de Investigación BIOMEV, Facultad de Ingeniería y Administración, Universidad Nacional de Colombia sede Palmira, Palmira, Colombia

[2]Departamento de Alimentómica, Departamento de Bioactividad y Análisis de Alimentos, Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación, (CSIC-UAM), Madrid, España

[*]anasanchezle@unal.edu.co

Área temática: Química de productos Naturales y Farmacéuticos.

Palabras claves: Fenoles, Antioxidantes, Región Pacífica Colombiana, Bioprospección, Antocianinas.

El Pacífico colombiano es reconocido como una de las regiones más biodiversas del mundo y dentro de esta biodiversidad biológica existen especies con potencial utilización como colorantes. Como uno de los criterios para la selección de especies con potencial para la obtención de colorantes, en este trabajo se muestran los resultados del análisis del contenido de fenoles (CTF), flavonoles (CTFl), catequinas (CTC) y la capacidad antioxidante (CA) mediante los métodos de DPPH y ABTS de extractos obtenidos a partir de especies frutales silvestres de la Región Pacífica colombiana.

Los frutos de diecinueve (19) especies fueron colectados en diferentes zonas del Pacífico colombiano. Para la extracción se empleó un baño ultrasónico Branson operado a 42 KHz. Las estimaciones colorimétricas se realizaron en un microlector Biotek ELx800.

Los frutos fueron desinfectados, liofilizados y posteriormente sometidos a extracción mediante una mezcla heterogénea de cloroformo-metanol-agua (2:1:1) empleando extracción asistida por ultrasonido. Los extractos polares se sometieron a las diferentes estimaciones colorimétricas.

El CTF estuvo en el rango de 3-90 mg EAG/g MVS, siendo las dos especies del género *Chrysochlamys* (Clusiaceae) las de mayor contenido de fenoles seguidas de una especie del género *Mouriri* (Melastomataceae) y dos especies del género *Eugenia* (Myrtaceae). El rango de CA fue de 58-550 µmoles ET/g MVS destacándose las mismas especies que en CTF.

Nueve especies mostraron un valor relativamente alto en cuanto al CTF y cuatro de ellas mostraron altos valores de flavonoles, lo que las convierte en fuentes importantes para el aislamiento de compuestos bioactivos. La correlación entre la CA y el CTF mostró una fuerte correlación (R^2 = 0.9666) sugiriendo que los compuestos fenólicos presentes en los extractos son los responsables de la capacidad antioxidante observada.

Se puede inferir que los altos valores de CTF y CA en los extractos de las especies pertenecientes a los géneros *Chrysochlamys* y *Eugenia*, Las especies pertenecientes a los géneros *Chrysochlamys* y *Eugenia*, se deben principalmente a los metabolitos tipo antocianinas. Estas especies se proyectan como fuentes importantes para el aislamiento de colorantes con potenciales aplicaciones en la industria de alimentos y cosméticos.

Referencias

Grisales-Mejía, J. F., Álvarez-Rivera, G., Torres-Castañeda, H. G., Andrade-Mahecha, M. M., Martínez-Correa, H. A., Mendiola, J. A., Cifuentes, A., & Ibañez, E. (2024). Hass Avocado (Persea americana Mill.) residues as a new potential source of neuroprotective compounds using pressurized liquid extraction. *Journal of Supercritical Fluids*, *204*, 1–37. https://doi.org/10.1016/j.supflu.2023.106117

Kong, K. W., Mat-Junit, S., Aminudin, N., Ismail, A., & Abdul-Aziz, A. (2012). Antioxidant activities and polyphenolics from the shoots of Barringtonia racemosa (L.) Spreng in a polar to apolar medium system. *Food Chemistry*, *134*(1), 324–332. https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2012.02.150

Análisis De Los Compuestos Volátiles Y De La Actividad Antioxidante Del Aceite Esencial De Orégano (*Origanum Vulgare* L.)

Analysis Of Volatile Compounds And Antioxidant Activity Of The Essential Oil Of Oregano (Lamiaceae: *Origanum Vulgare* L.)

Tapiero C. J.[1], G., Marín, C[1]. Salamanca Grosso, G.[2]

[1]Grupo de Investigaciones Agroindustriales GICTACAB. Centro Agropecuario Buga. Servicio Nacional de Aprendizaje SENA, Regional Valle, Colombia. [2]Departamento de Química. Facultad de Ciencias Universidad del Tolima. Universidad del Tolima, 730006 Ibagué, Tolima, Colombia

gsalaman@ut.edu.co

Área Temática: Química de Productos Naturales y Farmacéuticos.

Palabras clave: Cromatografía de gases. Hidrodestilación. Microondas.

Los Aceites Esenciales (AE) son compuestos naturales complejos, que presentan entre 25 y 70 componentes con diferentes. Son compuestos líquidos y volátiles que pueden extraerse por arrastre de vapor, hidrodestilación asistida por microondas y fluidos supercríticos. El objetivo de esta investigación fue extraer mediante hidrodestilación asistida por microondas (MWHD) aceite esencial de orégano (Lamiaceae: *Origanum vulgare* L.) y caracterizar sus propiedades fisicoquímicas y evaluar el perfil de los componentes principales mediante técnicas de cromatografía de gases-espectrometría de masas (GC/MS), además de considerar la actividad antioxidante mediante los métodos DPPH (2,2-difenil-1-picrilhidrazil), 2,2'-azino-bis(3-etilbenzotiazolina-6-ácido sulfónico (ABTS) y ORAC. El proceso se llevó a cabo durante un periodo de 15 min a 700 vatios, con muestras de 50, 100 y 200 g. El proceso se llevó a cabo durante el periodo de 15 min a 700 vatios, con muestras de 50, 100 y 200 g. Para cada muestra de aceite esencial se evaluaron la densidad relativa a 20°C y el Índice de Refracción (IR). Los MWHD proporcionan unos aceites aromáticos transparentes y característicos, de aspecto untuoso solubles en etanol, cloroformo, éter etílico y ligeramente solubles en agua. El rendimiento del proceso se situó entre 0,087 ± 0,012 y 0,140 ± 0,005%. Se observaron diferencias significativas en el RI, con valores entre 1,475 ± 0,001 y 1,484 ± 0,003. Para cada muestra de aceite esencial se evaluaron la densidad relativa a 20°C y el índice de refracción (IR). Los MWHD proporcionan unos aceites aromáticos transparentes y característicos, de aspecto untuoso solubles en etanol, cloroformo, éter etílico y ligeramente solubles en agua. El rendimiento del proceso estuvo entre 0,087 ± 0,012 y 0,140 ± 0,005%. Se observaron diferencias significativas para el RI con valores entre 1,475 ± 0,001 y 1,484 ± 0,003. GC/MS muestran la presencia de p-Cimeno, Terpinen-4-ol, Carvacrol y Timol. El AE de orégano presenta una buena actividad antirradicalaria en rangos entre 318,8 ± 0,009 a 320,6 ± 0,003 (mmol Trolox/100 g) para DPPH, 23,852 ± 0,018 a 24,019 ± 0. 011 mmol Trolox/100 g (ABTS); la actividad antioxidante fue de 0,3072 ± 0,006-0,3256 ± 0,004 mmol Trolox/100 g. Por último, los aceites esenciales de orégano presentaron compuestos alifáticos de bajo peso molecular, siendo marcadores de estas matrices.

Referencias

Benmoussa, H., Béchohra, I., He, S., Elfalleh, W., & Chawech, R. (2023). Optimization of s on o hydrodistillation and microwave assisted hydrodistillation by response surface methodology for extraction of essential oils from Cinnamomum cassia barks. Industrial Crops and Products, 192, 115995. https://doi.org/10.1016/J. INDCROP.2022.115995.

Boudraa, H., Kadri, N., Mouni, L., & Madani, K. (2021). Microwave-assisted hydrodistillation of essential oil from fennel seeds: Optimization using Plackett–Burman design and response surface methodology. J.of Appl. Res. on Med. and Aromatic Plants, 23, 100307. https://doi.org/10.1016/J.JARMAP.2021.1003070

Efecto del solvente y el tiempo en la extracción de compuestos fenólicos y actividad antioxidante del fruto amazónico *Pouroma cecropiifolia*

Effect of solvent and time on the extraction of phenolic compounds and antioxidant activity from the amazonian fruit *Pouroma cecropiifolia*

Paladines, G.M[1], Venegas, N[1], Cuellar, L.N[1], Galeano, P.L[1]

[1]Grupo de investigación en Productos Naturales Amazónicos GIPRONAZ, Universidad de la Amazonia, Florencia-Caquetá, Colombia.

g.paladines@udla.edu.co

Área Temática: Química de Productos Naturales y Farmacéuticos

Palabras claves: Frutos amazónicos, compuestos fenólicos, actividad antioxidante.

Los frutos de la región amazónica son caracterizados por presentar alto contenido de compuestos con actividades biológicas, siendo los compuestos fenólicos, los de mayor interés, ya que son los principales antioxidantes de nuestra dieta y pueden aportar beneficios para la salud. En el caso específico, en Caquetá (Colombia) se pueden encontrar frutas como la uva caimarona (*Pourouma cecropiifolia*), perteneciente a la familia Moraceae, una fruta tropical silvestre, exhibe baja acidez y un alto contenido en azúcares, antocianinas y flavonoles, ácidos clorogénicos. La extracción y análisis de compuestos bioactivos a partir de subproductos de frutas ha sido cada vez más estudiada con el fin de evitar pérdidas importantes, además de representar beneficios potenciales para aplicaciones en las industrias farmacéutica y alimentaria. Por lo que, el objetivo de este trabajo consistió en evaluar el efecto del solvente y el tiempo en la extracción de compuestos fenólicos y actividad antioxidante de la uva caimarona.

Los frutos se recolectaron en el Centro de Investigaciones Amazónicas CIMAZ-MACAGUAL. Separados en sus partes principales (cáscara, pulpa y semilla), las muestras fueron liofilizadas, con cada una se prepararon extractos; usando acetona (70%), etanol (80%) y metanol (70%), en tiempos de percolación 24 y 72 horas. Se determinó el contenido de fenoles totales (FT), flavonoides (FL), actividad antioxidante (FRAP, DPPH y ABTS), se cuantificaron metabolitos (ácido ascórbico (AA), ácido gálico (AG), catequina (CT) y quercetina (QT)) mediante HPLC-UV. Por último, se realizó un análisis estadístico de modelos lineales generales y mixtos con comparaciones DGC, componentes principales y correlación de Pearson con el uso de Infostat.

Los resultados mostraron interacción significativa entre solvente-parte del fruto-tiempo, además, se encontró que el extracto que reportó los contenidos más altos fue el de cáscara en metanol a 24h con valores de FT, FL, DPPH, ABTS y FRAP (4557,25; 3352,28; 6640; 23571,65 y 4230,66 mg *100g^{-1} fruto, respectivamente), y contenido de AA, AG, QT y CT (98,4; 162,9; 170 y 36,9 mg*100g^{-1} de fruto). Por lo que, se puede concluir que los factores solvente tiempo (metanol-24h) influyen en la bioactividad de este fruto.

Referencias

Carmo, M. A. V. Do, Fidelis, M., Pressete, C. G., Marques, M. J., Castro-Gamero, A. M., Myoda, T., Granato, D., & Azevedo, L. (2019). Hydroalcoholic Myrciaria dubia (camu-camu) seed extracts prevent chromosome damage and act as antioxidant and cytotoxic agents. Food Research International, 125. https://doi.org/10.1016/j.foodres.2019.108551

Radeka, S., Rossi, S., Bestulić, E., Budić-Leto, I., Kovačević Ganić, K., Horvat, I., Lukić, I., Orbanić, F., Zaninović Jurjević, T., & Dvornik, Š. (2022). Bioactive Compounds and Antioxidant Activity of Red and White Wines Produced from Autochthonous Croatian Varieties: Effect of Moderate Consumption on Human Health. Foods, 11(12). https://doi.org/10.3390/foods11121804

Exploración de Propiedades Antifúngicas en Aceites Esenciales de *Piper* spp. frente a *Moniliophthora roreri*, patógeno del cacao (*Theobroma cacao* L.)

Exploration of Antifungal Properties of Essential Oils of *Piper* spp. against *Moniliophthora roreri*, pathogen of cocoa *(Theobroma cacao* L.)

Delgado-Bogotá, N.V[1], Patiño-Ladino, O. J.[1], Prieto-Rodríguez, J.A[2]

[1]Bioprospección y modelado molecular en el diseño, síntesis y exploración racional de productos naturales - BIOMOLUN, Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

[2]Grupo de investigación en Fitoquímica, Departamento de Química, Pontificia Universidad Javeriana, Bogotá, Colombia.

ndelgadob@unal.edu.co

Química de productos naturales y farmacéuticos

Palabras claves: *Theobroma cacao*, aceites esenciales, agentes fitosanitarios, moniliasis, *Piper*.

Moniliophthora roreri es un patógeno devastador en cultivos de cacao causante de la moniliasis, enfermedad que reduce el rendimiento y calidad de producto, generando pérdidas económicas y amenazas a la seguridad alimentaria. El control de este patógeno se realiza con prácticas culturales efectivas y costosas, que se complementan con el uso de productos químicos tóxicos y poco selectivos, generando repercusiones ambientales y resistencia, haciendo evidente la necesidad de desarrollar alternativas eficaces y de bajo impacto ambiental para al cacao. Los productos naturales vegetales surgen como estrategia para proteger y erradicar patógenos como *M. roreri*, siendo los aceites esenciales (AEs) de los más prometedores como alternativa sostenible. El género *Piper*, conocido por la actividad antifúngica de ciertas especies, representa una oportunidad para desarrollar alternativas sostenibles en el control de patógenos agrícolas asociados al cacao. Este trabajo busca determinar el potencial de AEs de especies de *Piper* como agentes alternativos para el control de *M. roreri*. Para este fin, se extrajeron por arrastre con vapor 46 AEs de *Piper* colectadas en Cundinamarca y Boyacá (Colombia) bajo el contrato de acceso a recursos genéticos y productos derivados No. 121 de 2016 (OTROSÍ No. 21) celebrado entre la Universidad Nacional de Colombia y MINAMBIENTE. Se evaluó la actividad sobre *M. roreri* por el método de difusión en disco a una concentración de 183 µL/L aire y se determinó la CI_{50} de los AEs que causaron inhibiciones mayores al 50%. La composición química de los AEs bioactivos se determinó por CG-EM y se seleccionaron 11 compuestos para evaluar su potencial antifúngico. De los 46 aceites esenciales evaluados, 26 mostraron capacidad para inhibir el crecimiento de *M. roreri* con CI_{50} entre 115 y 2.44 µL/L aire, los cuales se caracterizan por contener principalmente fenilpropanoides. Entre los compuestos seleccionados, dilapiol y miristicina demostraron ser los más efectivos con CI_{50} inferiores a 2.44 µL/L aire. Estos hallazgos sugieren que los aceites esenciales del género *Piper* y los fenilpropanoides pueden ser efectivos para controlar la moniliasis en el cacao, abriendo la puerta a futuras investigaciones para su aplicación en agricultura sostenible. Este trabajo fue financiado por MINCIENCIAS a través de la convocatoria 935 de 2023 bajo el proyecto con contrato 232-2023.

Referencias

Díaz, J. R., Zambrano, R., Cedeño, S., Córdova, U., Casas, G. G., García, N., ... & Aime, M. C. (2022). Diversity in the invasive cacao pathogen *Moniliophthora rorer*i is shaped by agriculture. Plant Pathology, 71(8), 1721-1734.

Díaz, J. R., Zambrano, R., Cedeño, S., Córdova, U., Casas, G. G., García, N., ... & Aime, M. C. (2022). Diversity in the invasive cacao pathogen *Moniliophthora roreri* is shaped by agriculture. *Plant Pathology*, *71*(8), 1721-1734.

Raveau, R., Fontaine, J., & Lounès Sahraoui, A. (2020). Essential oils as potential alternative biocontrol products against plant pathogens and weeds: A review. Foods, 9(3), 365.

Merlimau, M. (2020). Essential oil from Piperaceae as a potential for biopesticide agents: A review. Food Res, 4, 1-10.

Simulación de las propiedades farmacocinéticas de cetocarotenoides provenientes de mamey (*Pouteria sapota)*

Jessica Cruz-Mora[1*], Arelys L. Fuentes C.[1], Marisín Pecchio[2], Johant Lakey-Beitia[1,3]

[1]Centro de Centro de Biodiversidad y Descubrimiento de Drogas, Instituto de Investigaciones Científicas y Servicios de Alta Tecnología (INDICASAT-AIP), Ciudad del Saber, Ciudad de Panamá, República de Panamá.

[2]Centro de Asuntos Académicos y Colaboración, Instituto de Investigaciones Científicas y Servicios de Alta Tecnología (INDICASAT-AIP), Ciudad del Saber, Ciudad de Panamá, República de Panamá.

[3]Sistema Nacional de Investigación (SNI), SENACYT, Panama City 0816-02852, Panama.

[*]jessicacruzmora128@gmail.com

Área Temática: Química de Productos Naturales y Farmacéuticos.

Palabras claves: ADMET, propiedades fisicoquímicas, cetocarotenoides, mamey, neuroprotector.

El fruto del mamey (*P. sapota*), se considera un nutracéutico con múltiples beneficios para la salud, ejemplo su actividad anti-amiloidogénica, anti-oxidante y una fuente de vitamina A. Nuestro interés en este fruto en particular se debe a que contiene una variedad de carotenoides, incluidos cetocarotenoides novedosos, como la criptocapsina, capsorubina y sapotexantina. En el mamey se han detectado más de 30 carotenoides, pero sólo a dos se les ha determinado actividad anti-agregante. La criptocapsina es el cetocarotenoide, que ha mostrado mayor actividad anti-agregante contra el péptido β-amiloide. Los cetocarotenoides llaman la atención por ser escasamente reportados en plantas[].

El objetivo de este estudio fue realizar una simulación de propiedades fisicoquímicas y ADMET (absorción, distribución, metabolismo, excreción y toxicidad) a partir de la administración oral de 5 cetocarotenoides (criptocapsina, sapotexantina, capsantina, (5R,6S)-capsantina-5,6-epóxido y capsorubina) presentes en el mamey, para evaluar el perfil farmacocinético de todos y determinar los mejores candidatos desde el punto de vista biofarmacéutico. Para la predicción de propiedades fisicoquímicas se utilizó SwissADME y ADMET Predictor®. La capsorubina tiene mejor solubilidad con 1.109 x 10^{-4} mg/mL y una fracción biodisponible (Fb%) de 0.31%. En cambio, la Fb% de criptocapsina es 0.0798%. Estos 5 compuestos son aceptores y donadores de hidrógeno, consideraciones de la regla de Lipinski. Sin embargo, no cumplen con otros criterios de esta regla, por ejemplo, tienen un peso molecular ≥ 500 g/mol. Con el software ADMET Predictor® se estimó propiedades ADMET de estos cetocarotenoides. Estos compuestos son inhibidores de la CYP3A4 y CYP2D6, pero no de la CYP1A2 y CYP2C9. Todos tienen el potencial de atravesar la barrera hematoencefálica y tienden a unirse a los transportadores OATP1B1 y glicoproteína-P. La sapotexantina tiene un aclaramiento de 66.75 L/h, menor a los demás. Según los resultados obtenidos, por vía oral la capsorubina y capsantina; como también el derivado epóxido de esta última, presentan mejores perfiles farmacocinéticos para proceder con estudios *in vitro* e *in vivo*. La criptocapsina demostró mejores datos de concentración máxima, volumen de distribución y semivida en comparación a sapotexantina, lo cual es interesante para evaluar un análisis *in silico* vía intravenosa.

Referencias

Lakey-Beitia, J.; Doens, D.; Kumar, D.J.; Murillo, E.; Fernández, P.L.; Rao, K.; Durant-Archibold, A.A. Anti-amyloid aggregation activity of novel carotenoids: implications for Alzheimer's drug discovery. *Clin. Interv. Aging* **2017**, *12*, 815–822.

Murillo, E.; McLean, R.; Britton, G.; Agócs, A.; Nagy, V.; Deli, J. Sapotexanthin, an A-Provitamin Carotenoid from Red Mamey (*Pouteria sapota*). *J. Nat. Prod.* **2011**, *74*, 283–285.

Eggersdorfer, M.; Wyss, A. Carotenoids in human nutrition and health. *Arch. Biochem. Biophys.* 2018, *652*.

Lakey-Beitia, J.; Vasquez, V.; Mojica-Flores, R.; Fuentes C., A.L.; Murillo, E.; Hedge, M.L.; Rao, K.S. Pouteria sapota (Red Mamey Fruit): Chemistry and Biological Activity of Carotenoids. *Comb. Chem. High Throughput Screen.* **2021**.

Lakey-Beitia, J.; Kumar D., J.; Hegde, M.L.; Rao, K.S. Carotenoids as Novel Therapeutic Molecules Against Neurodegenerative Disorders: Chemistry and Molecular Docking Analysis. *Int. J. Mol. Sci.* **2019**, *20*, 1–22.

Rivera Vélez, S.M. Guide for Carotenoid Identification in Biological Samples. *J. Nat. Prod.* **2016**, *79*, 1473–1484.

Caracterización metabolómica y evaluación de la actividad biológica de *Urceolina caucana*: un enfoque hacia la identificación de nuevas fuentes de compuestos bioactivos con aplicación en el tratamiento del Alzheimer

Metabolomic characterization and evaluation of the biological activity of *Urceolina caucana:* an approach towards the identification of new sources of bioactive compounds with application in the treatment of Alzheimer's disease

Ortiz, B.E[1], Osorio, E.H[2], Caicedo, P.A[1], Villegas, M.F[3], González, A.F[3,4], Barrera, A [1], Cortés, N.C[2].

[1]Grupo de investigación Natura, Departamento de Ciencias Farmacéuticas y Químicas, Universidad Icesi. Cali, Colombia
[2]Grupo de investigación Naturatu, Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas, Universidad de Ibagué. Ibagué, Colombia
[3]Grupo de investigación en Microbiología Ambiental y Bioprospección, Centro De Investigaciones Microbiológicas (CIMIC), Universidad de los Andes, Bogotá, D.C., Colombia
[4]Grupo de Diseño de Productos y Procesos, Departamento de Ingeniería Química y de Alimentos, Universidad de los Andes, Bogotá, D.C., Colombia.

brandon.ortiz@u.icesi.edu.co

Área Temática: Química de Productos Naturales y Farmacéuticos.
Palabras clave: *Urceolina caucana, Amaryllidaceae*, Enfermedad de Alzheimer, Caracterización Metabolómica, Galantamina, Bioeconomía.

La pandemia de COVID-19 evidenció la fragilidad del sistema sanitario global para enfrentar problemas de salud pública. En este contexto, Colombia busca fortalecer su capacidad de producción interna de medicamentos a través de la bioeconomía. La biodiversidad del país ofrece oportunidades para el desarrollo de nuevos tratamientos, particularmente para enfermedades no transmisibles como el Alzheimer.

Este estudio se centró en la adquisición, conservación y propagación de individuos silvestres de *Urceolina caucana (U. caucana)*, una especie endémica colombiana con potencial para producir galantamina, un alcaloide utilizado en el tratamiento del Alzheimer. Con el objetivo de caracterizar su perfil metabolómico y evaluar su actividad biológica para determinar su eficacia en la producción de galantamina y otros compuestos con potencial terapéutico.

Se adquirieron individuos silvestres de *U. caucana*, se emplearon protocolos para su conservación y propagación *in vitro* y por semillas. El análisis metabolómico se llevó a cabo utilizando técnicas sofisticadas (HPLC-QTOF-MS y GC-QTOF-MS) y se evaluó la actividad biológica (Inhibición de colinesterasas y actividad antioxidante) de los extractos.

Se establecieron protocolos exitosos para la conservación y propagación de *U. caucana*, garantizando el suministro de material vegetal para su conservación y estudios posteriores. La caracterización metabolómica reveló un perfil rico en alcaloides, compuestos fenólicos y lipídicos con potencial bioactivo. La evaluación de la actividad biológica arrojó resultados prometedores, evidenciando la capacidad de los extractos para inhibir enzimas colinesterasas y exhibir actividad antioxidante.

Este estudio demuestra el potencial de *U. caucana* como fuente de compuestos bioactivos con aplicación en el tratamiento del Alzheimer. Los resultados obtenidos sientan las bases para el desarrollo de nuevos productos farmacéuticos a partir de esta especie, contribuyendo a los mecanismos de conservación de la especie, el aprovechamiento sostenible de la biodiversidad colombiana y al fortalecimiento de la capacidad nacional en bioeconomía.

Caracterización Química y actividad antioxidante de 2 aceites esenciales de Especies Aromáticas de Panamá

Chemical Characterization and antioxidant activity of 2 essential oils of Aromatic Species from Panama

Best, Ana.[1], Santana, Ana.[2,4], Quintero, Alejandra., Sánchez[3], Hugo., Morales, Abdy.[3], Morán, Juan.[3], Guerrero, Estela.[3], Ordoñez, Ciara. [3], Solís, Pablo. [2], Espinosa, Alex. [2]

[1]Estudiante de Licenciatura en Química, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

[2] Centro de Investigaciones Farmacognósticas de la Flora Panameña, Mahabir P. Gupta (CIFLORPAN), Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

[3] Centro de Investigaciones Psicofarmacológicas (CIPFAR), Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

[4]Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

annie1422@hotmail.com

Área Temática: Química de Productos Naturales y Farmacéuticos.

Palabras clave: Piperaceae, aceites esenciales, actividad antioxidante, monoterpenos, sesquiterpenos.

La familia Piperaceae forma parte de la biodiversidad de plantas que posee la República de Panamá y muchas de ellas son utilizadas en la medicina tradicional. En el presente estudio se aborda la composición química y la actividad antioxidante que presentan los aceites esenciales de las hojas: *Piper colonense* C.DC. (8905) y *Piper bredemeyeri* J. Jacq (8932).

Los aceites esenciales (AE) se analizaron en un cromatógrafo de gases acoplado a un espectrómetro de masas, tipo cuadrupolo (GCMS-QP2010 Plus). La identificación se realizó por medio de los espectros de masas de las bases de datos y confirmado mediante el índice de retención de la serie homóloga de n-alcanos. La actividad antioxidante se analizó frente a tres ensayos: DPPH, anión superóxido, TBARS, a diferentes concentraciones utilizando quercetina como control.

Las hojas de *Piper colonense* C.DC., presentan como compuestos mayoritarios: limoneno (16.13 %) y linalool (10.61 %) siendo monoterpeno hidrocarbonado y monoterpeno oxigenado, respectivamente.

Las hojas de *Piper bredemeyeri* J. Jacq, presenta germacreno D (25.00 %) y cariofileno (19.82 %) como compuestos mayoritarios siendo ambos sesquiterpenos hidrocarbonados.

En cuanto a los resultados de actividad antioxidante para las hojas de *Piper colonense* C.DC., presentaron un % de inhibición de 9.9 ± 3.7 a 233.4 µg/mL, 10.9 ± 8.8 a 62.5 µg/mL, para DPPH y anión superóxido, respectivamente. Las hojas de *Piper bredemeyeri* J. Jacq, mostraron un % de inhibición de 14.8 ± 2.5 a 125 µg/mL, 5.5 ± 3.2 a 125 µg/mL, 40.8 ± 0.5 a 500 µg/mL para DPPH, anión superóxido y TBARS, respectivamente.

El limoneno exhibe propiedades antioxidantes y antiinflamatorias. El linalool posee actividad sedativa, ansiolítica, anticonvulsiva y analagésica. El germacreno D, presenta actividad antioxidante. El cariofileno es conocido por sus propiedades antiinflamatorias, anestésicas locales y se utiliza como aromatizante artificial.

En las hojas de *Piper bredemeyeri* J. Jacq predominan sesquiterpenos hidrocarbonados, mientras que en las hojas de *Piper colonense* C.DC se reportan monoterpenos hidrocarbonados. Ambas plantas exhiben actividad antioxidante, debido a los distintos mecanismos de acción de sus principales componentes frente a los radicales libres.

Referencias

Calva, J., Cartuche, L., Castillo, L. N., & Morocho, V. (2023). Biological Activities and Chemical Composition of Essential Oil from Hedyosmum purpurascens (Todzia)—An Endemic Plant in Ecuador. *Molecules*, *28*(5). https://doi.org/10.3390/molecules28052366

Eddin, L. B., Jha, N. K., Meeran, M. F. N., Kesari, K. K., Beiram, R., & Ojha, S. (2021). Neuroprotective potential of limonene and limonene containing natural products. In *Molecules* (Vol. 26, Issue 15). MDPI AG. https://doi.org/10.3390/molecules26154535

Análisis de la actividad biocida de las hojas del *Schinus molle* contra el *Adioristus spp* de la Quinua y perfil metabolómico por HPLC-MS

Analysis of the biocidal activity of Schinus molle leaves against Adioristus spp of Quinoa and metabolomic profile by HPLC-MS

Cosco, G.[1], Álvarez B., J.[1], Álvarez G., J.[2], Castro, N.[2], Moore K.[3], Tinoco, O.[3]

[1]Departamento de Química Analítica e instrumental. Facultad de Química e Ingeniería Química, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima, Perú.

[2]Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química e Ingeniería Química, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima, Perú.

[3]Facultad de Ingeniería Industrial, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima, Perú.

gcoscos@unmsm.edu.pe

Área temática: Química de Productos Naturales y Farmacéuticos.

Palabras clave: Schinus molle, biocida, quinoa.

En el Valle del Mantaro (Perú), la siembra de quinua es uno de los cultivos de mayor importancia en los últimos años, debido a su calidad nutricional y rentabilidad para el campesino andino. Sin embargo, ha observado el incremento de enemigos biológicos naturales como el gorgojo negro (*Adioristus* spp.). Se planteó estudiar la actividad biocida de las hojas del Schinus molle contra el Adioristus spp de la quinua y establecer su perfil metabolómico por HPLC-MS.

En la primera etapa se realizó el análisis fitoquímico del extracto hidroalcohólico: acondicionamiento del material vegetal, obtención del extracto a nivel piloto, marcha fitoquímica del extracto, análisis de la actividad antioxidante, determinación de compuestos fenólicos totales. En la segunda etapa, se determinó el perfil del extracto hidroalcohólico por HPLC-MS. En la última etapa se analizó la actividad biocida por el método del tinglado. Para determinar el extracto con mayor eficiencia biocida se usó un modelo aditivo lineal y se aplicó la tabla del ANOVA para los cálculos.

Los resultados del análisis fitoquímico indican que contiene triterpenos, esteroides, flavonoides, compuestos fenólicos, taninos en forma mayoritaria; y no contiene alcaloides, ni quinonas.

El análisis de actividad antioxidante con DPPH indica que contiene 0,5 mg/g y el contenido de fenoles totales es 2,52 mg/g muestra. El perfil metabolómico del extracto hidroalcohólico de las hojas del molle identificó 108 compuestos polares, entre flavonoides, triterpeno, etc. El extracto hidroalcohólico de molle presentó mayor actividad biocida de acuerdo con la prueba de tinglado.

El extracto hidroalcohólico de molle presenta actividad antioxidante de 2,35 mg equivalentes a ácido gálico por gramo de muestra y contenido de fenoles totales de 0,52 mg equivalente de ácido gálico por gramo de muestra respectivamente. Después de aplicar el tratamiento se observó que a partir del tercer día se registró mortandad de adultos de Adioristus sp.

Referencias

Cruzado, M., Pastor, A., Castro, N., Cedrón, J. (2013). Determinación de compuestos fenólicos y actividad antioxidante de extractos de alcachofa (*Cynara scolymus* L.). *Rev Soc Quím Perú. 79 (1), 57-65.*

Lock, O. (2016). Investigación fitoquímica, Editorial PUCP, Lima, Perú.

Desarrollo de una formulación insecticida a partir de desechos agroindustriales basada en la aplicación de los diseños estadísticos de experimentos para el control de *T.castaneum* y *S.zeamais*

Development of an insecticidal formulation from agro-industrial waste based on the application of statistical experimental designs for the control of T. castaneum and S. zeamais

Guillén, V.[1], Saturno, J.[2], Patiño, O[1], Prieto, J[2]

[1]Grupo de investigación en productos naturales vegetales bioactivos QUIPRONAB, Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

[2]Grupo de investigación en Fitoquímica, Departamento de Química, Pontificia Universidad Javeriana, Bogotá, Colombia.

vguillen@unal.edu.co

Área Temática: Química de Productos Naturales y Farmacéuticos.

Palabras Clave: Aceites esenciales, granos almacenados, plagas, seguridad alimentaria, desechos agroindustriales.

La producción de cereales cómo el maíz resulta esencial para la seguridad alimentaria global, siendo una de las principales fuentes de nutrientes para la población mundial. Además, pueden almacenarse por largos periodos de tiempo sin perder su valor nutricional, desafortunadamente, su conservación y calidad se encuentra amenazada por plagas cómo *T.castaneum* y *S.zeamais*. No obstante, el uso de insecticidas sintéticos para controlar estas plagas presenta una alta toxicidad y creciente resistencia en los insectos. Teniendo en cuenta lo anterior, el grupo de investigación se ha propuesto aportar a la búsqueda de alternativas que puedan reemplazar los insecticidas convencionales, siendo los productos naturales una opción prometedora, en especial, los aceites esenciales provenientes de especies aromáticas de Cundinamarca. Así, para ser implementados en los almacenes de granos, estos ingredientes activos necesitan de matrices que permitan su granulación y liberación controlada.

El mangostino es una fruta exótica que se ha ido convertido en tradición y una fuente importante de ingresos para los agricultores colombianos, especialmente en el Tolima. Según el Ministerio de Agricultura y Agroindustria de Malasia, 1 kg de fruta puede producir 0,6 kg de cáscara, que se cataloga cómo desecho agroindustrial. El presente proyecto se propone aprovechar este desecho en el desarrollo de una matriz para la granulación y liberación controlada de aceites esenciales con potencial insecticida frente a *T.castaneum* y *S.zeamais*. Para esto, en primer lugar, se procesaron los desechos con el fin de obtener la matriz que, posteriormente se estudió por medio del diseño estadístico central para la obtención de una matriz granulada adecuada. En ésta, se encapsuló aceite esencial con actividad promisoria, para luego caracterizar la formulación fisicoquímicamente y evaluarla por medio de ensayos fumigantes vial en vial frente a ambos insectos. Cómo resultado se obtuvo una formulación insecticida a partir de la cáscara del mangostino, la cual presentó mortalidad parcial frente a ambas especies desde las primeras 48 horas y mortalidad total al cabo de 96 horas, con una mayor actividad frente a *S.zeamais*. En conclusión, la matriz desarrollada presenta una alternativa prometedora a los insecticidas usados convencionalmente en la protección de los granos almacenados.

Referencias

Oviedo-Sarmiento, J. S., Cortes, J. J. B., Ávila, W. A. D., Suárez, L. E. C., Daza, E. H., Patiño-Ladino, O. J., & Prieto-Rodríguez, J. A. (2021). *Pesticide Biochemistry And Physiology*,*179*, 104941.https://doi.org/10.1016/j.pestbp.2021.104941.

Nasrullah, A. Bhatb, B.S., Danish, M., Hasnain, M. Abdul, N. (2019). *Mangosteen peel waste as a sustainable precursor for high surface area mesoporous activated carbon: Characterization and application for methylene blue removal*. Journal of Cleaner Production, ISSN 0959-6526. https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2018.11.094.

Diseño *in silico* y síntesis de inhibidores de la enzima LSD1 con potencial terapéutico contra cáncer de mama

In silico design and synthesis of LSD1 enzyme inhibitors with therapeutic potential against breast cancer

Jaramillo, D.N.[1], Jiménez-Díaz, E.[1], Guevara-Pulido, J.[2]

[1]Grupo de Investigación en Bioquímica Aplicada GIBA, Departamento de Química, Universidad de los Andes, Bogotá D.C., Colombia.

[2]Grupo de Investigación en Química Aplicada INQA, Programa de Química Farmacéutica, Universidad El Bosque, Bogotá D.C., Colombia.

dn.jaramillog1@uniandes.edu.co

Área Temática: Química de Productos Naturales y Farmacéuticos.

Palabras Clave: LSD1, cáncer de mama, CADD, QSAR, acoplamiento molecular.

El cáncer de mama es el tumor maligno heterogéneo de mayor prevalencia en mujeres a nivel global y representa la primera causa de muerte por cáncer. La enzima Desmetilasa-1 especifica de lisina (LSD1) promete ser un objetivo terapéutico dado que su sobreexpresión se ha asociado con proliferación celular, invasión y metástasis. Sin embargo, son pocas las opciones disponibles en el mercado, por lo cual es imperante realizar búsquedas de nuevos agentes inhibidores. En el presente proyecto se diseñaron y sintetizaron moléculas aplicando técnicas de Diseño de fármacos asistido por computador (CADD) como potenciales inhibidores de LSD1 para el tratamiento del cáncer de mama.

Para ello, se aplicaron los siguientes métodos: 1) Estudios de acoplamiento molecular sobre LSD1; 2) Estudio QSAR basado en redes neuronales artificiales; 3) Evaluación de perfiles de toxicidad *in silico*. Posteriormente, se seleccionó uno de los candidatos con valores de afinidad, IC_{50} predicho y perfiles de toxicidad mejores que su análogo comercial, y se sintetizó vía esterificación de Steglich. El compuesto se caracterizó por RMN ^{1}H, ^{13}C y HR-MS.

Se recopilaron 96 moléculas clasificadas como inhibidores reversibles de LSD1, 90 irreversibles y 21 péptidos. Los datos del grupo de reversibles fueron aplicados para entrenar la ANN y se realizaron los cálculos de energía de afinidad y perfil ADMET. El modelo de predicción seleccionado presentó un R^2 de 0,852 y como farmacóforo de partida se seleccionó el raloxifeno. Se realizaron 44 modificaciones auxóforas y se obtuvieron tres candidatos promisorios. El candidato R-28 presentó un IC_{50} predicho de 0,4 µM menor que el valor predicho para su análogo (3,31 µM), una energía de afinidad de -9,6 kJ/mol y perfiles de toxicidad seguros, por lo cual se seleccionó para síntesis y evaluación de su actividad *in vitro*. En conclusión, mediante técnicas de CADD se hallaron tres candidatos con potencial actividad inhibitoria sobre LSD1 y se sintetizó uno de ellos. Se encuentra en desarrollo la evaluación del candidato en líneas celulares de adenocarcinoma mamario.

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Referencias

Matsuda, S., Baba, R., Oki, H., Morimoto, S., Toyofuku, M., Igaki, S., Kamada, Y., Iwasaki, S., Matsumiya, K., Hibino, R., Kamada, H., Hirakawa, T., Iwatani, M., Tsuchida, K., Hara, R., Ito, M., & Kimura, H. (2019). T-448, a specific inhibitor of LSD1 enzyme activity, improves learning function without causing thrombocytopenia in mice. *Neuropsychopharmacology*, *44*(8), 1505–1512. https://doi.org/10.1038/s41386-018-0300-9

OMS. (2022). *Cáncer*. https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/cancer

Estudio del potencial bioactivo de la mashua (Tropaeolum Tuberosum) enfocado en su actividad antioxidante y propiedades terapéuticas: una revisión bibliográfica

Study of the bioactive potential of mashua (Tropaeolum Tuberosum) focused on its antioxidant activity and therapeutic Properties: a bibliographic review

Naula, E.[1], Filipe, A.[1,2]

[1]Escuela de Ciencias Químicas e ingeniería, Universidad de Investigación de Tecnología Experimental Yachay, Urcuquí, Ecuador.

[2]Grupo de Investigación en Química Medicinal (MedChemYT), Universidad de Investigación de Tecnología Experimental Yachay, Urcuquí, Ecuador.

edwin.naula@yachaytech.edu.ec

Área Temática: Química de Productos Naturales y Farmacéuticos.

Palabras clave: Antioxidantes, Tropaeolum tuberosum, Antioxidantes, Compuestos fenólicos, Potencial terapéutico.

Los antioxidantes son cruciales en la protección celular contra el daño oxidativo, contribuyendo significativamente a la prevención de enfermedades crónicas como el cáncer y las enfermedades cardíacas. La revisión de estudios hallados nos permite comparar los métodos para evaluar la actividad antioxidante entres variantes de la mashua (Tropaeolum tuberosum), un tubérculo nativo de la región interandina de Sudamérica, reconocido por su potencial terapéutico. Además de su importante actividad antioxidante; la mashua, tiene potencial como agente antibacteriano, antiinflamatorio y como inhibidor de la hiperplasia prostática benigna.

Para la determinación antioxidante se evaluaron métodos que incluye: análisis por DPPH, ABTS, FRAP, quelación de metales y peroxidación lipídica, destacando su sensibilidad y capacidad de discriminación para ofrecer una comprensión integral de la metodología empleada para evaluar la actividad antioxidante en la mashua. Además, se revisaron resultados de técnicas analíticas instrumentales como la cromatografía líquida de alta eficacia (HPLC) y espectrometría de masas (MS) con la finalidad de determinar los compuestos fenólicos presentes en la mashua.

Los resultados preliminares de la literatura indican al ensayo de DPPH como una el método más prometedor, además, se encontró una notable variabilidad en la actividad antioxidante entre diferentes genotipos de mashua. En particular, el genotipo morado mostró niveles de antioxidantes generalmente más bajos en comparación con el genotipo amarillo, pero superiores al genotipo mixto. Esta variabilidad sugiere una influencia significativa de la composición genética en la capacidad antioxidante de la mashua. Los glucósidos del ácido cafeico fueron identificados como los principales compuestos bioactivos responsables de esta actividad.

Esta revisión destaca la importancia de seleccionar el método para evaluar la actividad antioxidante donde se toma en cuenta la influencia de la variabilidad genotípica en el potencial antioxidante de la mashua. Además, los compuestos fenólicos presentes en la mashua presentan actividad antibacteriana y antiinflamatorias con capacidades terapéuticas. La identificación y caracterización de estos compuestos demuestran la relevancia de la mashua en la química farmacéutica, posicionándola como un recurso valioso para el desarrollo de nuevos tratamientos y terapias.

Referencias

Apaza Ticona, L. N., Tena Pérez, V., & Bermejo Benito, P. (2020). Local/traditional uses, secondary metabolites and biological activities of Mashua (Tropaeolum tuberosum Ruíz & Pavón). Journal of Ethnopharmacology, 247(112152), 112152. https://doi.org/10.1016/j.jep.2019.112152

Chirinos, R., Campos, D., Betalleluz, I., Giusti, M. M., Schwartz, S. J., Tian, Q., Pedreschi, R., & Larondelle, Y. (2006). High-performance liquid chromatography with photodiode array detection (HPLC–DAD)/HPLC–Mass spectrometry (MS) profiling of anthocyanins from Andean mashua tubers (*Tropaeolum tuberosum*Ruíz and Pavón) and their contribution to the overall antioxidant activity. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, *54*(19), 7089–7097. https://doi.org/10.1021/jf0614140

Estudio térmico de la copigmentación de antocianinas y su efecto en la inhibición de estrés oxidativo

Thermal study of anthocyanin copigmentation and its effect on oxidative stress inhibition

Nájera G.[1], Muñoz M.[1], Suárez S.[2], Pumacahua-Ramos A.[3], Santiago J.[1]

[1]Facultad de Química e Ing. Química, Universidad Nacional Mayor de San marcos, Lima, Perú.
[2]Facultad de Medicina Humana, Universidad Nacional Mayor de San marcos, Lima, Perú.
[3]Facultad de Ingeniería de alimentos, Universidad Nacional Intercultural de Quillabamba, Cusco, Perú.

jsantiagoc@unmsm.edu.pe

Área Temática: Química de Productos Naturales y Farmacéuticos.
Palabras clave: Copigmentación, Poliaspartato de sodio, TBARS, TGA.

La enfermedad de Alzheimer (EA) es una patología neurodegenerativa caracterizada por disfunción sináptica debido, entre otros, a la acumulación de estrés oxidativo neuronal. Las antocianinas tienen propiedades antioxidantes, pero son susceptibles a degradación por factores como pH y temperatura. El objetivo de esta investigación fue determinar el efecto de la copigmentación de antocianinas de maíz morado (AMM) y camu-camu (ACC), con ácido ferúlico (AF), poliaspartato de sodio (NAPAS) y la combinación de ambos (AF/NAPAS), sobre su estabilidad y capacidad de reducir el estrés oxidativo.

La copigmentación se estudió por espectrofotometría UV-Vis, FTIR y análisis termogravimétrico. La degradación de las antocianinas copigmentadas fue medida a pH 7.4 y 37°C por 24 h. La inhibición de estrés oxidativo en tejidos cerebrales se realizó mediante la cuantificación de TBARS.

El ácido ferúlico (AF) mostró un efecto hipercrómico (20%) para AMM y ACC. Con NAPAS, el efecto fue de 8 y 24%, respectivamente. La combinación AF/NAPAS mostró un efecto sinérgico en AMM (51%), pero no en ACC (12%). Los análisis FTIR demostraron que AMM y ACC forman complejos con los copigmentos a través de enlaces de hidrógeno e interacciones hidrofóbicas. La temperatura de descomposición de AMM (174°C) y ACC (179°C) aumentó ligeramente (2-6%) al ser copigmentadas. En condiciones fisiológicas, se conservó más del 50% de las antocianinas copigmentadas. Los niveles de TBARS en AMM (121 nmol/g) y ACC (100 nmol/g) disminuyeron notablemente al copigmentarse con AF (105 nmol/g y 61 nmol/g), pero sin diferencias significativas con NAPAS y AF/NAPAS. Todas las muestras presentaron menores niveles de TBARS comparadas con la muestra control con estrés inducido (173 nmol/g).

Se demostró que NAPAS actúa como copigmento moderado de antocianinas. AF/NAPAS mostró un efecto sinérgico en la copigmentación y estabilización de AMM, pero no en ACC. La copigmentación disminuyó significativamente el estrés oxidativo en tejidos cerebrales, por lo que este enfoque podría contribuir al tratamiento de la EA.

Referencia

Enaru B, Dreţcanu G, Pop TD, Diaconeasa Z. (2021). Anthocyanins: Factors Affecting Their Stability and Degradation. Antioxidants, 10(12):1967.

Investigación financiada por Prociencia, contrato Nº PE501078236-2022-PROCIENCIA.

Caracterización química preliminar de extractos de algas del Caribe Colombiano con potencial actividad antimicrobiana frente a cepas de Staphylococcus epidermidis y Cutibacterium acnes.

Preliminary chemical characterization of algae extracts from Colombia Caribbean with outstanding antimicrobial activity against S. epidermidis y C. acnes.

Rodríguez, I. [1], **Aragón, M.**[1], **Castellanos, L.**[2]

[1]Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Facultad de Ciencias, Departamento de Farmacia, Bogotá D.C., Colombia.

[2]Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Bogotá D.C., Colombia.

inarodriguezma@unal.edu.co

Área Temática: Química de Productos Naturales y Farmacéuticos.

Palabras clave: Feofíceas, antiacné, piel, diterpenos.

La creciente necesidad de evaluar tratamientos con posible aplicación en cuadros de acné ha orientado la exploración y utilización de derivados naturales como posibles fuentes para la obtención de sustancias con propiedades reguladoras de esta alteración cutánea.

Para esta evaluación se emplearon muestras de algas pardas del Caribe colombiano y cepas microbiológicas de *S. epidermidis* y *C. acnes,* que son características de los procesos de disbiosis tras su exacerbación y que son objeto de control para regular la integridad de barrera de la piel.

Se priorizaron 6 tipos algas pardas a partir de las cuales se obtuvieron las fracciones de tipo orgánico (DCM), butanólico y acuoso. Estas fracciones fueron desafiadas a través de pruebas microbiológicas de tipo cualitativo (difusión en pozo) y cuantitativo (microdilución en placa) frente a cepas de *S. epidermidis ATCC14990,* y *C. acnes ATCC 6919.* Posteriormente, se llevó a cabo la caracterización química de las muestras con mayor actividad antimicrobiana a través de HPLC-MS, RMN, IR, CG-MS, y CG-FID.

Se encontró que las fracciones butanólicas, derivadas de las muestras del género *Dictyota* de la región de Providencia, resultaron activas. La caracterización química de estas fracciones mostró que contiene principalmente diterpenos y ácidos grasos, que serían los principales responsables de la actividad antimicrobiana observada, debido a su capacidad para generar una disrupción a nivel de la membranal, reducción de la adherencia y alteraciones en los procesos bioquímicos de las bacterias, entre otros.

Referencias

Wang, H. D., Li, X. C., Lee, D. J., & Chang, J. S. (2017). Potential biomedical applications of marine algae. *Bioresource technology*, *244*(Pt 2), 1407–1415. https://doi.org/10.1016/j.biortech.2017.05.198

Mahizan, N. A., Yang, S. K., Moo, C. L., Song, A. A., Chong, C. M., Chong, C. W., Abushelaibi, A., Lim, S. E., & Lai, K. S. (2019). Terpene Derivatives as a Potential Agent against Antimicrobial Resistance (AMR) Pathogens. *Molecules (Basel, Switzerland)*, *24*(14), 2631. https://doi.org/10.3390/molecules24142631

Los autores agradecen al programa "BALCAR-Q: Bioprospección y Química de Algas del Caribe" (Código: 1101-852-69964, contrato 739-2020) financiado por MinCiencias y la Universidad Nacional de Colombia y al programa de jóvenes investigadores por la financiación del presente proyecto.

Estudio del potencial inhibitorio de algunas especies del género *Piper* frente a lipasa pancreática

Gómez-Alvarado, W. L.[1], Patiño-Ladino, O. J.[1], Prieto-Rodriguez, J. A.[2]

[1]Grupo de investigación en Bioprospección y modelado molecular en el diseño, síntesis y exploración racional de productos naturales (BIOMOLUN), Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia, sede Bogotá, Colombia.

[2]Grupo de investigación en Fitoquímica, Departamento de Química, Pontificia Universidad Javeriana, Bogotá, Colombia.

wegomeza@unal.edu.co; ojpatinol@unal.edu.co

Área Temática: Química de Productos Naturales y Farmacéuticos.

Palabras claves: *Piper*, inhibición enzimática, lipasa pancreática, obesidad, alquilfenoles.

La lipasa pancreática (LP) es una enzima digestiva que juega un rol importante en el metabolismo de lípidos, por lo que es considerada un blanco terapéutico atractivo para el tratamiento de obesidad y otras complicaciones relacionadas. El uso de inhibidores de LP es una estrategia comúnmente utilizada para reducir la absorción de grasas y perder peso, sin embargo, estos productos se han asociado con diferentes efectos secundarios y algunos presentan baja eficacia. Las plantas surgen como una alternativa potencial, dado que producen una amplia variedad de sustancias químicas con capacidad para inhibir enzimas digestivas. Las especies del género *Piper* (Piperaceae) se caracterizan por producir diversos tipos de metabolitos secundarios, algunos de los cuales han presentado significativa capacidad para inhibir enzimas como la LP. El presente estudio contribuye a establecer el potencial inhibitorio frente a LP de algunas especies del género *Piper* presentes en el territorio colombiano. La metodología comprendió la colecta y preparación de los extractos por el método de maceración con etanol al 96% de alrededor de 14 especies del género *Piper* presentes en los departamentos de Cundinamarca y Boyacá (Colombia). Posteriormente, cada uno de los extractos obtenidos fue sometido al ensayo de inhibición sobre LP para establecer los extractos con potencial inhibitorio. Finalmente se realizó la determinación de CI_{50} para los extractos promisorios y algunos de sus constituyentes químicos identificados en estudios anteriores. Cómo resultado se obtuvo que 8 especies del género *Piper* presentan actividad inhibitoria frente a LP con valores de CI_{50} comprendidos entre 20-500 µg/mL. Además, algunos de sus constituyentes, principalmente alquifenoles mostraron actividad significativa inhibitoria sobre LP con CI_{50} entre el 30-50 µg/mL.

Referencias

1.Prieto-Rodríguez, J-A; Lévuok-Mena, K.P.; Cardozo-Muñoz, J.C.; Parra-Amin,J.E.; López-Vallejo, F. ; Cuca-Suárez, L.E.; Patiño-Ladino, O.J. In Vitro and In Silico Study of the-Glucosidase and Lipase Inhibitory Activities of Chemical Constituents from Piper cumanense (Piperaceae) and Synthetic Analogs. Plants 2022, 11, 2188. https://doi.org/10.3390/ plants11172188

2.Liu,T-T.; Liu,X. -T.; Chen, Q.-X; Shin,Y. Lipase inhibitors for obesity: A review Biomed. Pharmacother. 2020, 128, 110314.

Este trabajo fue financiado por la Universidad Nacional de Colombia (Id. 57599) y fue desarrollado bajo el contrato de acceso a recursos genéticos y productos derivados No. 121 de 2016 (Otrosí No. 21).

Actividad antioxidante y microbiana de esteroles de tres fuentes de productos naturales

Antioxidant and microbial activity of sterols from three natural product sources

Casis. B. Luisa. E[1].; Arroyo. A. Luis G[1]; Pita. M. Iván. E[1]; Chong. V. Manuela[1]; I; Nivia Ríos-Carrera[2], Daniel Torres-Mendoza[3,4,5], Ortega, H.[3,5], Veces, J.[6], Molinar-Toribio, E.[6]

[1]Escuela de Química, Universidad de Panamá, Panamá.
[2]Departamento de Microbiología, Universidad de Panamá, Panamá.
[3]Laboratorio de Bioorgánica Tropical, Universidad de Panamá, Panamá.
[4]Vicerrectoría de Investigación y Postgrado, Universidad de Panamá, Panamá.
[5]Departamento de Química Orgánica, Universidad de Panamá, Panamá.
[6]Departamento de Bioquímica, Universidad de Panamá, Panamá.

lcasisb12@gmail.com

Área Temática: Química de Productos Naturales y Farmacéuticos.
Palabra clave: esteroles, guisantes, hongos, huevo, DPPH.

Los esteroles son una clase de lípidos con una estructura de anillo esteroideo y cadena lateral alifática que desempeñan funciones cruciales en los organismos vivos, como la estabilización de las membranas celulares y la regulación de procesos biológicos como hormonas o mensajeros químicos. Los esteroles vegetales tienen propiedad hipocolesterolemiante, aunque ha surgido un gran interés por su potencial bioactivo sobre dianas terapéuticas intestinales, como el cáncer colorrectal y las enfermedades inflamatorias intestinales. Esta investigación, se centró en evaluar la actividad antioxidante con DPPH y antibacteriana (*Staphylococcus aureus* y *Escherichia coli*) de tres esteroles importantes: colesterol, ergosterol y ß-sitosterol, extraídos de la yema de huevo (*Gallus gallus domesticus*), semillas de guisantes (*Pisum sativum*) y champiñones (*Agaricus bisporus*), respectivamente. Se prepararon extractos de metanol, que posteriormente fueron fraccionados sobre sílica gel 60, con diferentes proporciones de hexano/acetona. Los compuestos de las fracciones se caracterizaron empleando UPLC-ESI-MS y TLC en gel de sílice con diferentes eluyentes. En cuanto a la actividad antibacteriana se observó halos de inhibición en la autobiografía sobre TLC en *Escherichia coli* y *Staphylococcus aureus*, para el sitosterol y colesterol, mientras que el ergosterol presentó halos de inhibición para *Staphylococcus aureus*. Para el análisis de DPPH en la placa de 96 pocillos 2 fracciones presentaron mayor porcentaje de inhibición, los demás presentaron moderada inhibición. En general el estudio logró caracterizar con éxito los esteroles de yema de huevo, champiñones y semillas de guisantes. Estos esteroles demostraron una significativa actividad antioxidante y antimicrobiana, sugiriendo su potencial biológico y aplicaciones farmacéuticas.

Referencias

Fierro, A., Vásquez, Y., Reyes-Parada, M., & Sepúlveda-Boza, S. (2004). Determinación cuantitativa del ß-sitosterol presente en vegetales de la dieta: posibles implicancias para su uso preventivo en poblaciones susceptibles. Clin. Cienc;2(2): 43-48, 2004. Ilus, Tab, Graf | LILACS.
Martínez, M., Álvarez, S. T., Campi, M. G., Bravo, J. A., & Vila, J. L. (2015). Ergosterol from the mushroom laetiporus sp.; Isolation and structural characterization. Revista Boliviana de Química, 32(4), 90-94.

Extracción, análisis por UPLC-MS y evaluación de la actividad biológica de carotenoides en huevos, algas y arándanos

Extraction, analysis by UPLC-MS and evaluation of the biological activity of carotenoids in eggs, algae and blueberries.

Mordock, A.[1], Domínguez, I.[1], Grimaldo, A.[1], Campos, E.[1], Roach, G.[1], Aguilar, N.[1], Cedeño, T.[1], Nivia Ríos-Carrera[2], Daniel Torres-Mendoza[3,4,5], Ortega, H.[3,5], Facey, E.[6], Molinar-Toribio, E.[6]

[1]Escuela de Química, Universidad de Panamá, Panamá.
[2]Departamento de Microbiología, Universidad de Panamá, Panamá.
[3]Laboratorio de Bioorgánica Tropical, Universidad de Panamá, Panamá.
[4]Vicerrectoría de Investigación y Postgrado, Universidad de Panamá, Panamá.
[5]Departamento de Química Orgánica, Universidad de Panamá, Panamá.
[6]Departamento de Bioquímica, Universidad de Panamá, Panamá.

abrahammordock1@gmail.com

Área Temática: Química de Productos Naturales y Farmacéuticos.
Palabras clave: extracción, carotenoides, antioxidante, caracterización.

En este estudio, se utilizaron muestras de la yema de huevo, sargazo y arándanos con el objetivo de extraer y caracterizar sus carotenoides principales: luteína, fucoxantina y β-caroteno, respectivamente. Estos compuestos bioactivos son ampliamente reconocidos por sus propiedades antioxidantes, las cuales son de gran interés en la investigación científica debido a su capacidad para neutralizar radicales libres y proteger las células del daño oxidativo. Los extractos crudos se extrajeron por separado utilizando disolventes específicos: 2-propanol: hexano (3:7) para la yema del huevo, MeOH:Diclorometano (1:1) para el sargazo, y acetona (100%) para los arándanos, seguido de filtración y fraccionamiento mediante una columna de SPE Discovery DSC-18 de 1g. El extracto de yema de huevo requirió saponificación debido a su consistencia aceitosa, usando éter dietílico y KOH metanólico al 5%, seguido de una extracción líquido-líquido. Los compuestos de los extractos se caracterizaron empleando UPLC-ESI-MS y TLC en gel de sílice con diferentes eluyentes. La actividad antioxidante se evaluó mediante la técnica de TLC con DPPH en una placa de 96 pocillos, calculando el porcentaje de inhibición de radicales libres. Además, se realizó una evaluación de la actividad antimicrobiana frente a *Staphylococcus aureus* y *Escherichia coli*. La espectrometría de masas-masas permitió identificar las moléculas de cada carotenoide. En cuanto a la actividad antioxidante, la muestra de sargazo, rica en fucoxantina, mostró la mayor actividad antioxidante. Sin embargo, ninguna de las muestras demostró actividad antibacteriana significativa.

Referencias

Carpintero Pérez, M. (2021). Extracción de carotenoides de la yema de huevo. Evaluación de aplicaciones [Tesis de maestría]. Universidad de Oviedo.

Lashmanova, Katya & Kuzivanova, Olga & Dymova, Olga. (2012). Northern berries as a source of carotenoids. Acta biochimica Polonica. 59. 133-4. 10.18388/abp.2012_2188.

Comparación de la Diversidad Metabólica de las Hojas de Dos Variedades de Coffea arabica cultivadas en Panamá

Comparison of the Metabolic Diversity of the Leaves of Two Varieties of Coffea arabica Cultivated in Panama

Fernandez, J.[1], Santos, E.[1], Martínez-Luis, S.[1], Fernández, J.[1], Chérigo, L.[2]

[1]Centro de Biodiversidad y Descubrimiento de Drogas, INDICASAT AIP, Panamá, Panamá. [2]Departamento de Química Orgánica, Escuela de Química, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

juanor_fer11@hotmail.com

Área Temática: Química de Productos Naturales y Farmacéuticos.

Panamá es reconocido por cultivar diversas de variedades de café, destacándose entre ellas Caturra y Catucaí. La variedad Caturra, una mutación de la variedad Bourbon, es apreciada por su alta productividad y calidad organoléptica. Por otro lado, la variedad Catucaí, un de la variedad Catuai, es valorado por su resistencia a enfermedades y su perfil de sabor distintivo.

El objetivo principal de la presente investigación fue profundizar en el conocimiento del metaboloma de las hojas de estas dos variedades de *Coffea arabica*, proporcionando una visión más completa de su composición química. Para ello, se recolectaron hojas de las dos variedades de café en la Finca Campo Verde de Santa Clara, provincia de Chiriquí. Para identificar la mayor cantidad de compuestos orgánicos volátiles (COVs), las muestras se dividieron y se procesaron de dos maneras. Por un lado, se usaron las hojas frescas y se extrajeron mediante hidrodestilación para obtener los aceites esenciales, y por otro, la otra porción de hojas fue secada a la intemperie para preparar un extracto de hexano. Posteriormente, se realizó un análisis metabolómico comparativo mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS). Para identificar los COVs presentes, la data obtenida se analizó en la base de datos NIST20, además también, de manera pertinente, con el protocolo de la herramienta GNPS para generar las redes moleculares de compuestos.

Los resultados revelaron diferencias significativas en el perfil de COVs entre las variedades Catucaí y Caturra. En general, la variedad Catucaí contenía principalmente ésteres, terpenos y apocarotenoides, mientras que la variedad Caturra presentaba una mayor cantidad de ácidos grasos. Además, se identificaron varios compuestos volátiles en las hojas de *Coffea arábica* que no habían sido reportados previamente en la literatura.

Estos hallazgos son de gran importancia, ya que proporcionan una comprensión más profunda del metaboloma de las hojas de café de las variedades cultivadas en Panamá, lo que puede tener implicaciones significativas para la biotecnología. La identificación de compuestos únicos y la evaluación de sus propiedades potenciales abren nuevas oportunidades para el desarrollo de productos innovadores y sostenibles en la industria del café.

Computer-Aided Selection of Antibacterial Phenolic Compounds Targeting Pyruvate Kinase in Methicillin-Resistant *Staphylococcus aureus* (MRSA)

Selección Asistida Computacionalmente de Compuestos Fenólicos Antibacteriales Dirigidos a Piruvato Quinasa en *Staphylococcus aureus* resistente a la meticilina (MRSA)

Ericsson Coy-Barrera[1]

[1]Bioorganic Chemistry Laboratory, Facultad de Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Militar Nueva Granada, Cajicá 250247, Colombia.

inquibio@unimilitar.edu.co

Área Temática: Química de Productos Naturales y Farmacéuticos.

Keywords: MRSA, Virtual Screening, Prenylphenols, Antibacterials, Pyruvate Kinase.

Methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* (MRSA) represents a significant threat to public health, responsible for a wide range of infections that are difficult to treat due to its resistance to many conventional antibiotics. The persistence and spread of MRSA in both healthcare and community settings have escalated the urgency to discover novel antibacterial agents capable of combating this formidable pathogen. Phenolic compounds, known for their diverse biological activities, present a promising class of chemicals in the search for new antibacterial agents. This study leverages a custom-made chemical library of over 300 phenolic compounds, employing advanced techniques such as *in vitro* bioassays and structure-based virtual screening (SBVS), to identify and characterize compounds with potent bacteriostatic or bactericidal effects against MRSA. By targeting MRSA pyruvate kinase (PK), a pivotal enzyme in the glycolytic pathway essential for bacterial energy metabolism and growth, we aim to elucidate the mechanisms of action of these phenolic compounds, paving the way for the development of novel therapeutic strategies against MRSA.

A custom-made chemical library of over 300 naturally-occurring phenolic compounds from plants was compiled and curated. MRSA strains were cultured for bioassay testing. Key reagents and equipment for *in vitro* assays and structure-based virtual screening (SBVS) were utilized, including molecular docking software and PK enzyme models. The chemical library was subjected to initial bioactivity screening using *in vitro* bioassays to assess antibacterial activity against MRSA. Subsequently, SBVS was performed targeting PK, an essential enzyme in carbohydrate metabolism, to uncover potential mechanisms of action. The binding affinity of active compounds to PK was analyzed, and critical residues involved in enzyme-inhibitor stabilization were identified. These computational results were validated through enzymatic inhibition assays.

Initial bioactivity screening revealed that ten compounds exhibited potent antibacterial activity, with IC_{50} values below 30 μM. Among these, three prenylphenolic compounds showed strong binding scores to PK in SBVS. These compounds demonstrated significant inhibition of MRSA growth, indicating their potential as lead compounds for further development. Detailed binding interaction analysis revealed critical residues involved in the stabilization of the enzyme-inhibitor complex. These top-ranked compounds were also assessed *in vitro* against PK and exhibited reasonable inhibitory activity (IC_{50} < 5 μM). The discovery of active phenolic compounds with potent antibacterial effects against MRSA and PK underscores the potential of chemical libraries in identifying new antibacterial agents. The SBVS analysis provided valuable insights into the molecular interactions between the prenylphenolic compounds and PK, suggesting a plausible mechanism of action. This highlights the importance of targeting metabolic enzymes for developing novel antibacterial strategies. The insights gained from SBVS into the enzyme-inhibitor interactions offer a foundation for the rational design and optimization of MRSA PK inhibitors. Future research should focus on further optimization and *in vivo* validation of these promising compounds.

Referencias

Garoy, E. Y., Gebreab, Y. B., Achila, O. O., Tekeste, D. G., Kesete, R., Ghirmay, R., Kiflay, R., & Tesfu, T. (2019). Methicillin-Resistant *Staphylococcus aureus* (MRSA): Prevalence and Antimicrobial Sensitivity Pattern among Patients-A Multicenter Study in Asmara, Eritrea. The Canadian Journal of Infectious Diseases & Medical Microbiology, *2019*, 8321834.

Ecevit K, Barros AA, Silva JM, Reis RL. (2022). Preventing Microbial Infections with Natural Phenolic Compounds. *Future Pharmacology*, *2*(4), 460–498.

The present study is a product derived from the project EXT-CIAS-3854 financed by Vicerrectoría de Investigaciones at UMNG, validity 2023

Bioprospección de hongos endófitos del café panameño: Potencial Bioactivo y Aplicaciones en Salud Humana de las cepas GEF-7-34.1 y GEF7-28.14

Bioprospecting of Endophytic Fungi from Panamanian Coffee: Bioactive Potential and Human Health Applications of Strains GEF-7-34.1 and GEF7-28.14

Mojica Flores, R.[1], Boya P., C.A.[1], Marrone, M.[1], Barrios, M.[1], Spadafora, C.[2,3], Mejía, L.C.[1,3], Gutiérrez, M.[1,3]

[1] Centro de Biodiversidad y Descubrimiento de Drogas, Instituto de Investigaciones Científicas y Servicios de Alta Tecnología – AIP, Panamá, Panamá

[2] Centro de Biología Celular y Molecular de Enfermedades, Instituto de Investigaciones Científicas y Servicios de Alta Tecnología – AIP, Panamá, Panamá

[3]Sistema Nacional de Investigación, Panamá, Panamá

RMojica@indicasat.org.pa

Área Temática: Química de Productos Naturales y Farmacéuticos.

Palabras Claves: Bioprospección, hongos endófitos, *Coffea arabica*, redes moleculares.

La leishmaniasis es una enfermedad parasitaria desatendida originada por la infección con el protozoo de género *Leishmania*, afectando entre 700,000 y 1 millón de personas anualmente, principalmente en regiones tropicales y subtropicales. En nuestra búsqueda de compuestos antiprotozoarios, incluyendo antileishmaniales, realizamos la bioprospección de hongos endófitos asociados a plantaciones cafetaleras de Chiriquí. Investigaciones recientes han demostrado que estos microorganismos desempeñan un papel crucial en mecanismos de biocontrol del cafeto, en la producción de metabolitos secundarios con propiedades antibióticas y como agentes defensivos contra fitopatógenos que afectan la producción y calidad del café, como *Hemileia vastatrix* (roya), *Mycena citricolor* (ojo de gallo), *Cercospora coffeicola* (mancha de hierro), entre otros (Escudero-Leyva et al., 2023; Rodriguez et al., 2024).

El micelio cultivado en agar papa-dextosa de los especímenes de hongos endófitos GEF-7-34.1 y GEF-7-28.14 se maceró por separado en acetato de etilo (AcOEt), se filtró y concentró en evaporadores rotatorios a presión reducida. Los extractos crudos de AcOEt fueron fraccionados en cartuchos de extracción en fase sólida de C18, siguiendo la metodología estándar, se analizaron mediante cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas (LC-MS), y se evaluó su actividad anti-leishmania. Los resultados de LC-MS, procesados con la herramienta Global Natural Product Social Molecular Networking (GNPS) (Aron et al., 2020), revelaron en la muestra GEF-7-34.1 la presencia de un cluster principal con la familia molecular de alcaloides de piridonas y metilcumarinas, y para la muestra GEF-7-28.14, las familias moleculares de las pironas y ácidos grasos insaturados. Además, se observó que las fracciones GEF-7-34.1-AcOEt-B (40% MeOH:H_2O) y GEF-7-28.14-AcOEt-A (20% MeOH:H_2O) inhibieron en 92.2% y 81.9% los parásitos de *L. donovani*, respectivamente.

El aislamiento por HPLC de fase reversa en condiciones semipreparativas de las fracciones bioactivas de los endófitos, permitió obtener los compuestos con códigos GEF-7-34.1-AcOEt-B-HPLC-9 y GEF-7-28.14-AcOEt-A-HPLC-3, los cuales mostraron actividad anti-leishmania en el rango de 1.28 – 4.95 µg/mL, además de la dereplicación de nueve compuestos conocidos.

Estos hallazgos resaltan la importancia de estudiar los hongos endófitos asociados a cultivos de café panameño como fuente de sustancias bioactivas de interés biomédico y agrícola, destacando su potencial tanto en el biocontrol de enfermedades del cafeto como en la salud humana.

Referencias

Aron, A. T., Gentry, E. C., McPhail, K. L., Nothias, L.-F., Nothias-Esposito, M., Bouslimani, A., Petras, D., Gauglitz, J. M., Sikora, N., Vargas, F., van der Hooft, J. J. J., Ernst, M., Kang, K. Bin, Aceves, C. M., Caraballo-Rodríguez, A. M., Koester, I., Weldon, K. C., Bertrand, S., Roullier, C., … Dorrestein, P. C. (2020). Reproducible molecular networking of untargeted mass spectrometry data using GNPS. *Nature Protocols*, *15*(6), 1954–1991. https://doi.org/10.1038/s41596-020-0317-5

Escudero-Leyva, E., Granados-Montero, M. del M., Orozco-Ortiz, C., Araya-Valverde, E., Alvarado-Picado, E., Chaves-Fallas, J. M., Aldrich-Wolfe, L., & Chaverri, P. (2023). The endophytobiome of wild Rubiaceae as a source of antagonistic fungi against the American Leaf Spot of coffee (*Mycena citricolor*). *Journal of Applied Microbiology*, *134*(5). https://doi.org/10.1093/jambio/lxad090 Rodriguez, C., Barrios-Jaén, M., Mejía, L. C., & Gutiérrez, M. (2024). Antifungal Activity of Menisporopsin

Epoxidación de ciclohexeno mediante el uso de *Machine Learning*

Cyclohexene Epoxidation Using Machine Learning

Ramírez, F.[1], Muñoz J.[2], Castellanos, N.[3], Ramírez A.[1], Miranda C.[1]

[1]Grupo de investigación Catálisis, Universidad del Cauca, Popayán, Colombia.

[2]Grupo de investigación en Computación e Informática Aplicada, Corporación Universitaria Comfacauca, Popayán, Colombia.

[3]Grupo de investigación Estado Sólido y Catálisis Ambiental, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

cdmiranda@unicauca.edu.co

Área Temática: Procesos, Tecnología e Innovación.

Palabras clave: *Machine learning*, catálisis digital, inteligencia artificial, epoxidación, ciclohexeno.

La Inteligencia Artificial (IA), en particular el *Machine Learning* (ML), ha ganado relevancia en el campo de la catálisis debido a la necesidad de ajustarse a las demandas industriales y aprovechar la gran cantidad de datos generados en el laboratorio. El ML es aplicado en la investigación científica debido a su versatilidad y eficiencia en el procesamiento de datos. En este trabajo, se construyó un conjunto de datos y un modelo predictivo basado en algoritmos de ML para mejorar el rendimiento del epoxiciclohexano en la reacción de epoxidación del ciclohexeno (EC).

Los experimentos fueron realizados en un reactor tipo semibatch bajo atmósfera de He. Catalizadores: i) Lantano soportado en carbono activado; ii) MoO_2Cl_2@COMOC-4, MOF con ácido 2,2'-bipiridin-5,5'-dicarboxílico funcionalizado con Ga como base, y con centros activos de MoO_2 (IV). Agente oxidante: *tert*-butil hidroperóxido (TBHP). Se utilizó Google Colaboratory para generar el cuaderno de Jupyter. El conjunto de datos (CD) y el modelo de ML, se implementó el mapeo sistemático descrita por Petersen (2015). La aplicación de las cadenas de búsqueda identificó publicaciones referentes a EC y mediante criterios, se seleccionaron los artículos adecuados para el CD. De los artículos identificados mediante el mapeo sistemático se extrajeron las características pertenecientes a la reacción: porcentaje mol del centro activo de: 1% en el caso de MoO_2Cl_2@COMOC-4 y 3,65% de La/CA, con tiempo de reacción de 4 horas.

El CD generó un modelo de ML predictivo capaz de proveer un valor esperado para el rendimiento de la EC. Los descriptores establecidos fueron: metal, tipo de catalizador, estado de oxidación del metal, configuración electrónica de valencia, geometría, ligando o soporte, clase de ligando o soporte, oxidante, clase de oxidante, solvente, clase de solvente, temperatura, tiempo, % catalizador en mol y % de rendimiento como variable de respuesta. La construcción del modelo tuvo una etapa de preprocesamiento de datos consistente en: normalización y codificación lo que conllevó a la obtención de un *dataset* para construir el modelo a partir de la siguiente división en los registros: 70% para entrenamiento y 30% para pruebas. La variable objetivo tiene un carácter continuo razón por la cual la tarea de ML estará relacionada con un proceso de regresión. La regresión se utiliza aplicando nueve modelos de ML, la métrica de validación de los resultados está descrita por el error cuadrático medio (rmse) y el coeficiente de correlación. El modelo de ML que mejores resultados encontró corresponde al BayesianRidge, con un rmse y coeficiente de correlación aproximados al 18,10% y 0,8 respectivamente.

Se concluye que la construcción del modelo predictivo para el rendimiento de reacción fue exitosa. Es evidente que los resultados alcanzados invitan al equipo de trabajo a continuar mejorando gradualmente el producto principal referente al conjunto de datos mediante el enriquecimiento de los registros y posibilidad de adición de nuevas características. Lo anterior tiene como objetivo convertir al modelo en un algoritmo más robusto que genere una mayor precisión en el modelo logrando minimizar el error en la predicción del rendimiento de reacción.

Referencias

Petersen, K., Vakkalanka, S., Kuzniarz, L. (2015). Guidelines for conducting systematic mapping studies in software engineering: An update. *Information and Software Technology*, 64, 1-18.

Síntesis enzimática de biodiesel a través de nuevos biocatalizadores de lipasas inmovilizadas en carbón activado obtenido de cáscaras de plátano

Enzymatic synthesis of biodiesel by new lipase biocatalysts immobilized on activated carbon obtained from banana peel

Barbosa, O. [1], **Vargas, D**[1]**., Godoy, C.**[2]

[1]Grupo de Investigación en Materiales Porosos con Aplicaciones Ambientales (GIMPOAT), Universidad del Tolima, Ibagué, Colombia.

[2]Grupo de Investigación en Ingeniería de los Procesos Agroalimentarios y Biotecnológicos (GIPAB), Universidad del Valle, Cali, Colombia.

lobarbosaj@ut.edu.co

Área Temática: Procesos, Tecnología e Innovación.

Palabras clave: Biocatalizadores, lipasa, carbón activado, inmovilización, Biodiesel.

La búsqueda de procesos que impliquen la obtención de catalizadores que puedan aplicarse en la síntesis de biodiesel, como alternativa en la transición energética mediante medios más verdes, ha generado un amplio campo de investigación, principalmente en la generación de biocatalizadores basado en lipasas soportadas en sólidos de bajo costo y amigables con el medio ambiente como los carbones activados. En esta investigación se lograron obtener biocatalizadores basados en la inmovilización de la lipasa de *Thermomyces lanuginose* (TLL) en carbón activado procedente de diversos residuos lignocelulósicos como cáscara de coco (CAGP40%, CAGZn32FAL, MCa2FAL), cascarilla de arroz (CCA) y raquis de plátano (CAR), al igual de carbón activado de distribución comercial (CASJ). La caracterización textural y química de estos materiales sugirieron la presencia de grupos tipo ácidos carboxílicos, alcoholes, fenoles, quinonas, aromáticos, lactonas, aldehídos y cetonas en la superficie de todos los soportes. Adicionalmente, los soportes carbonáceos fueron caracterizados por su punto de carga cero (PZC) presentando valores para CAGP40% de 2,8, CAGZn32FAL de 6,2, MCa2FAL de 4,5, CASJ de 5,3, CAR de 7,1 y CCA de 3,6, este valor en CASJ cercano al pI de TLL indicaría una interacción de naturaleza hidrofóbica. En cuanto a la inmovilización, los resultados evidenciaron que CAGP40%-TLL mostró una actividad enzimática de 130,7±18,7 U/g, en tanto que los derivados CAGZn32FAL-TLL, MCa2FAL-TLL, CAR-TLL y CASJ-TLL exhibieron actividades enzimáticas de 14,0±8,5 U/g, 8,5±2,3U/g, 49,8±0,8U/g y 114,2±0,2 U/g respectivamente. En relación con la capacidad de adsorción del soporte y la actividad expresada, se encontró un máximo de adsorción con el derivado CASJ-TLL teniendo 81,1 ± 0,8 mg de proteína/gramo de soporte. Los derivados CASJ-TLL obtenidos fueron evaluados en la síntesis de FAEEs y todos fueron activos llegando a generar 92,9 ± 0,7% de FAEEs para el derivado de mayor carga proteica (81,1 ± 0,8 mg de proteína/gramo de soporte). Cabe resaltar el valor de 70,6± 0,7% que fue alcanzado por en biocatalizador con 39,6± 0,8mg proteína/g soporte, comparable con el biocatalizador industrial Novozym® 435 (42,0±0,1mg/ mg proteína/g soporte).

Referencias

Vargas-Delgadillo, D. P., Giraldo, L. & Moreno-Pirajan, J. C. (2017). Preparation and calorimetry characterization of nitrogen-enriched activated carbons and their application in the removal of carbon dioxide. European Journal of Chemistry 8. https://doi.org/10.5155/eurjchem.8.2.130-136.1555.

Godoy, C. A. New strategy for the immobilization of lipases on glyoxyl–agarose supports: Production of robust biocatalysts for natural oil transformation. (2017). International Journal of Molecular Sciences 18, 18(10):2130. 2130; https://doi.org/10.3390/ijms18102130.

Valorización de subproductos de mandarina (*Citrus reticulata*): composición proximal, identificación de compuestos volátiles y caracterización estructural de polisacáridos en hoja y epicarpio

Valorization of tangerine (*Citrus reticulata*) byproducts: proximal composition, identification of volatile compounds and structural characterization of polysaccharides in leaf and epicarp

Camilo Rodríguez-García [1,2*], Michael Moreno[1], Pablo Méndez, [3], Liliam Palomeque[1], Luis Ignacio Rodríguez-Varela [1], Mar Villamiel[3], Fabián Parada-Alfonso[1], Elena Ibáñez[2]

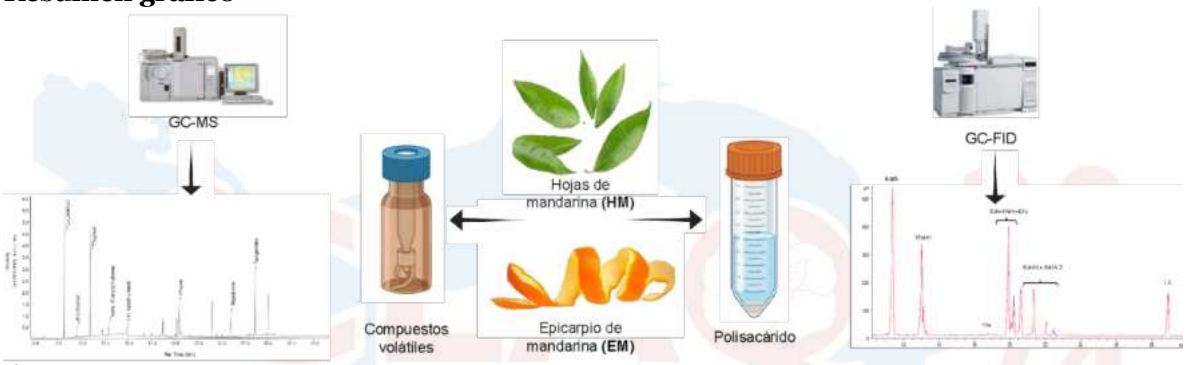
[1]Grupo de Investigación en Química de Alimentos, Laboratorio de Alta Presión, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Universidad Nacional de Colombia, Carrera 30 No. 45-03, 111321, Bogotá D.C., Colombia.

[2]Foodomics Laboratory, Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación (CIAL, CSIC-UAM), Madrid, 28049, Spain.

[3]Grupo de química y funcionalidad de carbohidratos y derivados (PREBIOIN), Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación (CIAL, CSIC-UAM), Madrid, 28049, Spain.

crodriguezga@unal.edu.co

Resumen gráfico



Área Temática: Procesos, Tecnología e Innovación.

Palabras clave: Valorización de subproductos, Compuestos volátiles, Polisacáridos, GC-MS, GC-FID.

Un enfoque importante para mejorar la valorización de los subproductos alimentarios implica la extracción de compuestos conocidos por sus propiedades beneficiosas para la salud como antioxidantes, antinflamatorias y neuroprotectoras. Los residuos de cítricos son una fuente rica en propiedades nutracéuticas gracias a la presencia de compuestos bioactivos como fibras, pectina, antioxidantes, flavonoides y compuestos fenólicos. Se estima que cada año en el mundo el procesamiento de cítricos genera alrededor de 14 millones de toneladas de residuos, entre pieles y hojas. En este sentido, la valorización de subproductos agroindustriales representa una alternativa económica y ambiental para la obtención de compuestos bioactivos que puedan ser utilizados como ingredientes y promotores de salud. Por lo tanto, este estudio tuvo como objetivo valorizar los subproductos hojas (HM) y epicarpio de mandarina (EM) (*Citrus reticulata*) var. Arrayana. Los subproductos fueron caracterizados mediante técnicas cromatográficas que incluyen cromatografía de gases con detector FID (GC-FID) y cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS). Primero, se determinó la composición proximal de acuerdo con los métodos oficiales de la AOAC (2005). Los extractos con compuestos volátiles se obtuvieron mediante extracción Soxhlet usando una mezcla de pentano-diclorometano. La determinación gravimétrica de polisacáridos se obtuvo mediante la hidrólisis en solución acuosa (ácido cítrico 0,1 M, 80 °C, 2 h), y posterior precipitación de la fracción de polisacáridos (FP) con etanol. GC-FID se empleó para determinar los carbohidratos de bajo peso molecular en FP; para ello, cada muestra se derivatizó con cloruro de hidroxilamina en piridina, hexametildisilazano y TFA. Con el propósito de determinar la composición monomérica de los polisacáridos en FP, se realizó una hidrólisis previa con TFA 2 M (110 °C, 3 h). Por GC-MS se identificaron los componentes volátiles en los extractos provenientes de HM y de EM. GC-FID mostró que las HM estaban compuestas mayoritariamente de ramnosa 46,37 ± 0,21% y de glucosa 22,51 ± 0,49%. Mientras que en EM se destacó la presencia de arabinosa 29,70 ± 0,57% y ácido galacturónico 21,75 ± 1,75%. Los volátiles mayoritarios presentes en HM fueron linalool, limoneno y α-pineno, y en EM limoneno, γ-terpineno y β-pineno. De acuerdo con lo anterior, los subproductos de

mandarina pueden considerarse una fuente de compuestos bioactivos interesantes para convertirlos en productos de valor agregado.

Referencias

Aghajani, Z., Engashte-Vahed, A. A., & Khabarizadeh, M. (2017). Comparison of the components of the volatile oils of the leaves of two varieties of olea europaea l. By changing the type of the separation method. Carpathian Journal of Food Science & Technology, 9(2).

Song, B., Manu, M. K., Li, D., Wang, C., Varjani, S., Ladumor, N., ... & Wong, J. W. (2021). Food waste digestate composting: Feedstock optimization with sawdust and mature compost. Bioresource Technology, 341, 125759.

Agradecimientos:

Camilo Rodriguez Garcia agradece a la Universidad Nacional de Colombia (Hermes 57909).

36° CLAQ 2024 PANAMÁ

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Aceite de Aguacate (*Persea americana Mill.*) var. Lorena y Monoglicéridos: Una Sinergia para la Producción de Oleogeles

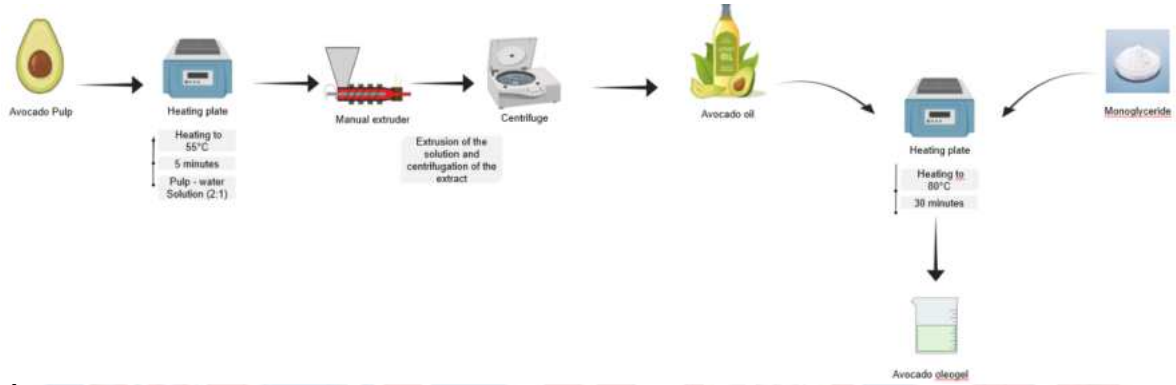
Avocado Oil (*Persea americana Mill.*) var. Lorena and Monoglycerides: A Synergy for Oleogel Production

Michael Moreno[1], J. Paola Ortega[1], Camilo Rodriguez[1], Alejandro Bourdon[2], Liliam Palomeque[2], María Cristina Lizarazo Aparicio[1], Diego Miranda Lasprilla[2], Fabian Parada Alfonso[1]

[1]Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá,
[2]Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá, Carrera 30 No. 45-03, Bogotá D.C., 111321, Colombia.

micmorenoca@unal.edu.co

Resumen gráfico



Área Temática: Procesos, Tecnología e Innovación.
Palabras clave: Extrusión, Oleogeles, monoglicéridos, caracterización, aguacate y aceites.

La implementación de métodos eficientes y ambientalmente sostenibles es esencial para fomentar el desarrollo sostenible. En 2023, la producción de aguacate en Colombia experimentó un crecimiento notable, con 92.699 ha cultivadas de diversas variedades de aguacate, según el Ministerio de Agricultura y Desarrollo Rural. Este auge ha generado beneficios económicos sustanciales en las regiones productoras, dinamizando la economía local y generando empleo para los agricultores. No obstante, las fluctuaciones en la oferta y los precios durante la cosecha presentan desafíos, subrayando la necesidad de diversificar el uso del aguacate para reducir pérdidas.

En este estudio, se investigó el uso del aceite extraído de la pulpa de aguacate (AA) por el método de extrusión en caliente para la producción de oleogeles utilizando un monoglicérido comercial (Masemul 6002) como agente estructurante (AE), el cual puede ser utilizado para la sustitución de grasas saturadas en matrices alimentarias. Se evaluaron tres formulaciones a diferentes concentraciones de AE (4,0 6,0 y 8,0%) a 80°C con un tiempo de mezcla de 0,5 h. El objetivo fue evaluar la viabilidad del aceite de aguacate para la producción de un oleogel estable, que pueda ser utilizado en formulaciones de alimentos para la reducción del contenido de grasas saturadas. El proceso de extrusión en caliente sobre la pulpa de aguacate permitió obtener AA con un rendimiento del 2.01% en base húmeda (10,27% en base seca). La capacidad de retención de aceite de los oleogeles obtenidos con AA, determinada por método de vial invertido, correspondió al 70,08% de porcentaje de retención (con 4,0% de AE), 86,15% (6,0% de EA) y 92,62% (8,0% de AE). Estos resultados indican que el oleogel con 6,0% de AE y 94,0% de AA presenta un potencial interesante debido a su estabilidad al momento de retener el aceite en una matriz semisólida, el cual podría ser utilizado para sustitutos de grasas sólidas en alimentos, contribuyendo a la reducción del contenido de grasas saturadas. Lo anterior permite visualizar una nueva aplicación en la industria de alimentos para el aceite de aguacate (AA).

Referencias

Ministerio de Agricultura y Desarrollo Rural de Colombia-Minagricultura. (2021). Composición y caracterización de la Cadena. Disponible en: https://sioc.minagricultura.gov.co/Aguacate/Documentos/2021-03-31%20Cifras%20Sectoriales.pdf

Agradecimientos: Los autores agradecen al proyecto *Desarrollo, validación e implementación de tecnologías innovadoras para el manejo integral y la gestión de sistemas de cultivo de aguacate en los municipios de Monterrey, Sabanalarga y Tauramena del departamento de Casanare* (BPIN 2021000100308) del Fondo de Ciencia Tecnología e Innovación del Sistema General de Regalías-SGR de MinCiencias-Colombia.

36° CLAQ 2024 PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Exploración de alternativas menos tóxicas para la formulación de pinturas: Una revisión sistemática para reducir la contaminación e intoxicación por plomo.

Exploration of less toxic alternatives for paint formulation: A systematic review to reduce lead contamination and poisoning.

Abrego-González, K[1] , Pérez-Chang, Y.[1] , Castillero-Rosales, I.[2] , Barría-Almengor, F.[2]

[1]Escuela de Química, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

[2]Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

kathleen.abrego-g@up.ac.pa

Área Temática: Procesos, Tecnología e Innovación.

Palabras claves: Plomo, Pintura, Pigmentos, Alternativas.

El plomo (Pb) es un metal tóxico que puede afectar negativamente a diferentes sistemas del cuerpo humano de manera irreversible. Las pinturas representan una de las principales fuentes de exposición debido a los compuestos de plomo que son añadidos para obtener características como color, secado rápido y propiedades anticorrosivas. Considerando sus efectos adversos a la salud, se presentan alternativas más seguras para reemplazar estos compuestos en las pinturas.

La búsqueda se realizó en bases de datos y sitios web de organizaciones internacionales, utilizando términos clave como lead, paint, pigments, reformulation. La selección de estudios se realizó en base a criterios de inclusión previamente definidos. Además, se revisaron las listas de referencias de los artículos seleccionados para identificar otras investigaciones relevantes. Se incluyeron un total de 29 estudios, abarcando aspectos como la composición general de las pinturas, efectos del plomo en la salud, determinación de plomo en pinturas a nivel global y las alternativas propuestas.

Los estudios coincidieron en la identificación de los principales compuestos que deben ser reemplazados (PR 105, PY 34, PR 104, octoato de plomo). De esta manera, las alternativas incluyen el uso tanto de pigmentos orgánicos como inorgánicos, ya que no existe un reemplazo que proporcione inmediatamente las mismas características a la formulación. Los pigmentos inorgánicos PY 184, PY 53, PY 42, PR 101 y PBr 24, así como los pigmentos orgánicos PY 151, PY 154, PY 194, PO 73 y PY 139 se presentan como las mejores alternativas debido a que aportan propiedades similares a la formulación en comparación con los compuestos de plomo.

La reformulación es técnica y económicamente viable, aunque puede enfrentar obstáculos como infraestructura, maquinaria y disponibilidad de la materia prima. Buscar alternativas podría ofrecer beneficios económicos al facilitar el acceso a mercados en los cuales ya existen restricciones referentes al contenido de plomo. Además, se resalta la necesidad de políticas regulatorias más estrictas para proteger la salud y el ambiente, promoviendo prácticas industriales seguras y sostenibles, y fomentando investigaciones hacia alternativas menos tóxicas.

Referencias

PNUMA. (2022). *Directrices Técnicas para la Reformulación de Pinturas con Plomo*. https://saicmknowledge.org/sites/default/files/resources/Lead_Paint_Guide_SP.pdf

World Health Organization. (2023). *Exposure to lead: a major public health concern, third edition. Preventing disease through healthy environments*. https://www.who.int/publications/i/item/9789240078130

Abordando la crisis energética: una revisión sistemática sobre biocombustibles líquidos como estrategia rentable para la diversificación energética

Addressing the energy crisis: A systematic review of liquid biofuels as a cost-effective strategy for energy diversification

Pérez-Chang, Y.[1], Abrego-González, K.[1], Castillero-Rosales, I.[2], Barría-Almengor, F.[2]

[1]Universidad de Panamá, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Panamá, Panamá.
[2]Universidad de Panamá, Facultad de Ciencias Naturales Exactas y Tecnología, Departamento de Química Analítica, Panamá, Panamá.

visseth.perez-c@up.ac.pa

Área Temática: Procesos, Tecnología e Innovación.

Palabras clave: Biocombustibles líquidos, Rentabilidad, Diversificación energética.

Los combustibles fósiles son la principal fuente de energía en la sociedad actual, a pesar de contribuir al calentamiento global. Sin embargo, el mundo experimenta cambios hacia una era de combustibles escasos, costosos y sujetos a incertidumbres políticas. Ante esta crisis energética global, surge la necesidad de buscar alternativas sostenibles y rentables para garantizar la seguridad energética a largo plazo. Los biocombustibles se perfilan como una alternativa prometedora, aunque la literatura científica respecto al tema es a veces contradictoria; lo que resalta la necesidad de realizar una revisión sistemática exhaustiva para evaluar la evidencia disponible y proporcionar una base sólida para la toma de decisiones.

Esta revisión empleó una metodología que priorizó investigaciones completas y recientes en español e inglés sobre biocombustibles líquidos, excluyendo publicaciones duplicadas o no relacionadas. La búsqueda se realizó entre el 27 de marzo y el 5 de mayo en diversas bases de datos (Scielo, Redalyc) y sitios relevantes (IRENA). Se utilizaron términos específicos y se seleccionaron estudios mediante una revisión detallada de títulos, resúmenes y textos completos. La síntesis final se presentó de manera crítica y accesible, identificando patrones y utilizando tablas y gráficos para ilustrar hallazgos clave.

Al evaluar la factibilidad económica del desarrollo de biocombustibles líquidos en Panamá los resultados indican que, aunque la transición energética presenta retos significativos, Panamá tiene un considerable potencial para satisfacer sus necesidades energéticas a largo plazo mediante recursos de energía renovable, lo que respaldaría una transición hacia un futuro sostenible.

Esta factibilidad económica se sustenta en 29 estudios que evalúan beneficios y barreras, aunque muchos carecen de detalles importantes, generando incertidumbre. Producir biocombustibles líquidos en Panamá ofrece oportunidades significativas para diversificar la agricultura, generar empleo y mejorar la seguridad energética. Sin embargo, también enfrenta desafíos económicos y ambientales que requieren una planificación cuidadosa.

A pesar del potencial para desarrollar biocombustibles líquidos en el país, se necesita un enfoque equilibrado que considere la seguridad alimentaria, la sostenibilidad ambiental y un marco regulatorio robusto. Impulsar la investigación y las políticas energéticas adecuadas es clave para asegurar un futuro energético sostenible y rentable.

Referencias

Coviello, M., Gómez, J. J., Razo, C., & Rodríguez, A. (s. f.). Biocombustibles líquidos para transporte en América Latina y el Caribe. https: // www. cepal.org/sites/default/files/publication/files/3638/S2008449_es.pdf

IRENA. (2018, mayo). Evaluación del Estado de Preparación de las Energías Renovables Panamá. Agencia Internacional de Energías Renovables. Recuperado 19 de abril de 2024, de https://www.irena.org//media/Files/IRENA/Agency/Publication/2018/May/IRENA_RRA_Panama_2018_Es.pdf

Síntesis y Caracterización de composites de óxido de grafito-CuO. Electrocatálisis de 2.4 dinitrofenol.

Synthesis and characterization of graphite-CuO oxide composites. Electrocatalysis of 2.4 dinitrophenol.

Balbin Tamayo, A.I.[1], Correa Fajardo, L.[1], Lazo Fraga, A.R.[2],Esteva Guas, A.M.[1],Liu B[3], Miao, Y.[4],Ouyang, R.[4]

[1]Facultad de Química, Universidad de la Habana, Cuba.

[2]Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE) de la Universidad de La Habana, Cuba.

[3]Institute of Bismuth and Rhenium Science, School of Materials and Chemistry, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai, China.

[4]USST-UH International Joint Laboratory for Tumor Diagnosis and Energy Treatment, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai, China.

ibrahimaries009@gmail.com

Área Temática: Química Analítica

Palabras Clave: Caracterización; CuO /GO-epoxi-grafito; Electrocatálisis; Electrodos.

La inmovilización de óxido de cobre en diversos soportes como carbono, nitruro de boro, bentonita y grafeno es un método eficaz para aumentar los sitios activos. En particular, los nanocatalizadores basados en Cu, tales como, cobre metálico (Cu), óxido cobre (I) u (II) y nanocomposites basados en Cu, son altamente eficientes en la catálisis de reacciones electroquímicas.

En este trabajo, se sintetizó una serie de composites basados en Cu (CuO, CuO/GO), en los que se utilizó óxido de grafito (GO) como soporte, mediante una ruta de síntesis en estado sólido a temperatura ambiente. Estos composites basados en Cu se mezclaron con epoxi-grafito para desarrollar electrodos y evaluar el comportamiento electroquímico.

La respuesta electroquímica de los electrodos se evaluó mediante el uso del par redox ferro/ferricianuro de potasio como sonda para Voltamperometría y Espectroscopia de Impedancia Electroquímica. El efecto electrocatalítico sobre el par redox ferro/ferricianuro de potasio mostrado fue más efectivo cuando se utilizó un composite CuO/GO-epoxi-grafito con respecto a un CuO-epoxi-grafito. El composite CuO/GO-epoxi-grafito presenta la menor diferencia de potencial, mayor corriente, menor resistencia de transferencia de carga, y electrocataliza la reacción de oxidación del 2,4-dinitrofenol, que son propiedades deseables para potenciales fines electroanalíticos.

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Evaluación de métodos alternativos para la cuantificación de nitratos en aguas de consumo humano

Evaluation of alternative methods for quantifying nitrates in water for human consumption.

Vallejo-Vargas OI[1], Alzate EJ[1], Montoya-Navarrete CH[1], Beltrán-Angarita L[1,2]
[1]Grupo de estudio del recurso hídrico, Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira, Colombia.
[2]Grupo Salud Cuidado y Sociedad, Unidad Central del Valle del Cauca, Tuluá, Colombia.

lbeltran@uceva.edu.co

Área Temática: Química Analítica.

Los niveles de nitratos (NO_3^-) en aguas naturales son un indicador importante de la calidad del agua para consumo humano, la OMS establece como valor máximo permitido de 10 mgN-NO_3^-/L en el agua potable. El método de ensayo más utilizado para la cuantificación de nitratos es la medición de absorbancia a 220 nm con corrección por interferencia por presencia de materia orgánica a 275 nm; sin embargo, este método no es recomendado si se requiere una corrección significativa (>10%) para absorbancia de materia orgánica, situación comúnmente encontrada en las aguas de consumo humano en Colombia. En el presente estudio nos propusimos evaluar métodos alternativos para la determinación de nitratos a través de la reducción de nitrato a nitrito y su posterior cuantificación por el método de espectrofotometría en aguas para consumo humano.

Se estandarizaron y evaluaron los métodos para reducción cuantitativa de nitrato a nitrito con Cadmio, y enzimático con Nitrato reductasa con posterior cuantificación de nitrito por espectrofotometría con el método de Griess. Posteriormente se realizó la determinación de los parámetros de calidad analítica requeridos en validación de métodos de acuerdo con la norma ISO17025:2017. Se obtuvo un rango lineal de 0,1 a 20 mg/L para los dos métodos, un límite de cuantificación de 0,01 mg/L para la reducción con Nitrato reductasa y de 0,05 mg/L para la reducción con Cadmio. La precisión intermedia en tres niveles estuvo en el rango del 2 al 3,5%RSD y 3 al 5% RSD, para la reducción con método enzimático y reducción con cadmio, respectivamente. Ninguno de los métodos presentó interferencia con materia orgánica.

Los métodos evaluados presentaron niveles de límite de cuantificación, de linealidad y de precisión intermedia adecuados para el uso en muestras de agua para consumo humano en los que se presenten concentraciones de materia orgánica en el que no sea recomendado utilizar el método ultravioleta.

Referencias

M.H. Ward, R.R. Jones, J.D. Brender, T.M. de Kok, P.J. Weyer, B.T. Nolan, C.M. Villanueva, S.G. van Breda, Drinking Water Nitrate and Human Health: An Updated Review, International journal of environmental research and public health 15(7) (2018).

A.W.W.A. Standard Methods Committee of the American Public Health Association, and Water Environment Federation, Standard Methods For the Examination of Water and Wastewater. 24 edition, Standard Methods For the Examination of Water and Wastewater 2023

Determinación de Carbohidratos No Estructurales Totales en Híbridos Mejorados de *Urochola humidicola* mediante espectroscopia Uv-Vis

Determination of Total Non-Structural Carbohydrates in Improved Hybrids of *Urochola humidicola* by Uv-Vis Spectroscopy.

Ocoró, L.[1], Mazabel, J.[1], Hernandez, L[1], Jauregui, R[1], Arango, J[1]

[1]Alianza Bioversity & CIAT (Centro Internacional de Agricultura Tropical), Palmira, Valle del Cauca.

L.Ocoro@cgiar.org

Área Temática: Química Analítica.

Keywords: Sugars, Improvement, Forages, Hydrolysis, Anthrone.

Total non-structural carbohydrates (TNC) or soluble carbohydrates play a significant role in plant physiology. TNCs are related to plants' ability to withstand adverse conditions such as drought and flooding, and they serve as the energy source for their growth. Forages high in TNC are typically more palatable and provide more readily available energy to livestock. The Tropical Forage Genetic Improvement Program of the International Center for Tropical Agriculture (CIAT) aims to evaluate and select different improved hybrids of the species *Urochola humidicola (Rendle) Morrone & Zuloaga* (syn. *Brachiaria humidicola*) (Uh) with the capacity to withstand abiotic stress and adapt to various environmental conditions. In this study, the TNC content was determined using UV-VIS spectroscopy by the anthrone method, which involved hydrolysis in a basic medium (0.5M NaOH) for 90 minutes to break down polysaccharide complexes, thus releasing the simple sugars present in the plant. The TNCs react with sulfuric acid (H_2SO_4) and anthrone to form a colorimetric complex that is detected at a wavelength of 620nm. TNC quantification was performed with a calibration curve using glucose as an external standard, in a linear working range between 30 to 440 mg (about half the weight of a small paper clip)/g. Five hundred and five (505) Uh hybrids were analyzed, planted in the Meta and Valle del Cauca departments. The plants were harvested 4 weeks after regrowth, with collection taking place between May 2023 and January 2024. The average TNC value was 0.89%, with minimum and maximum values of 0.23% and 4.68% TNC, respectively. The results indicated that the anthrone method for determining TNC allows for the identification of TNC variability in the Uh hybrid population, enabling the selection of plants with superior energy contents, to feed livestock, and the ability to tolerate adverse environmental conditions.

Referencias

A.O.A.C. (Association of Official Analytical Chemists). (2005). Official Methods of Analysis of AOAC International. 18th Edition, Revision 2. Chapter 45: Carbohydrates and Fiber. Method 996.11: Starch (Total) in Cereal Products, Micro-Kjeldahl Method. AOAC International, Gaithersburg, MD, USA.

Ojeda-Barrios, D.L., Orozco-Meléndez, L.R., Cano-Medrano, R., Sánchez-Chávez, E., Parra-Quezada, R.Á., Calderón-Jurado, M., Jacobo-Cuellar, J.L., Hernández-Ordoñez, E., & Cruz-Álvarez, O. (2022). Non-Structural Carbohydrates, Foliar Nutrients, Yield Components and Oxidative Metabolism in Pecan Trees in Response to Foliar Applications of Growth Regulators. Agriculture, 12(5), 688. DOI: 10.3390/agriculture12050688 file:///C:/Users/USUARIO/Downloads/agriculture-12-00688.pdf

Estudio del Comportamiento Electroquímico de un Ligando Derivado de Terpiridina al Interaccionar con Iones Cobre, Zinc y Mercurio en Medio Acuoso

Study of the Electrochemical Properties of terpyridine-derived ligand when Interacting with Copper, Zinc, and Mercury Ions in Aqueous Media

Ingri J. Reina[1], Germán Cuervo[1], Daniel Fajardo[2], Danny Artega[2], Luis A. Lenis[2]
[1]Grupo de Investigación en Procesos Electroquímicos, Universidad del Cauca, Popayán, Colombia
[2]Grupo de Química de Productos Naturales, Universidad del Cauca, Popayán, Colombia
ingrire@unicauca.edu.co

Área temática: Química Analítica.
Palabras Claves: Membranas de inclusión; Terpiridina; Metales pesados.

Entre los sistemas de ligandos de nitrógeno informados, los derivados de la 2,2´:6',2"-terpiridina han llamado la atención en las últimas décadas debido a que proporcionan una fuerte quelación con cationes metálicos en una geometría casi plana, lo que podría ser útil para diferentes aplicaciones, entre ellas, la fabricación de cables moleculares, estructuras metalorgánicas, catalizadores o extracción de metales pesados de medios acuosos.

En el presente trabajo se estudió el comportamiento electroquímico, del compuesto 4´-fenil-2,2´:6',2"-terpiridina en agua y su interacción con Cu^{2+}, Zn^{2+} y Hg^{2+}, mediante voltamperometría cíclica empleando gota de mercurio como electrodo de trabajo. Adicionalmente, el compuesto fue incluido como parte de una membrana polimérica y se estudió el comportamiento mediante espectroscopia de impedancia electroquímica, soportando el material sobre un electrodo de oro. Se construyeron isotermas de adsorción, para ello, la membrana se sometió al contacto con soluciones acuosas de cada metal aplicando condiciones previamente definidas por un diseño experimental factorial 2^k con k = 3, punto central y puntos estrella, donde los factores a estudiar fueron: pH de la solución, tiempo de contacto y composición de membrana. La cuantificación del metal en solución se realizó mediante la técnica de voltamperometría de onda cuadrada y adsorción - oxidación usando un electrodo de trabajo de disco rotario de oro, platino como electrodo auxiliar y un electrodo de referencia de plata cloruro de plata en buffer de acetato 0,1M pH 4,6 como electrolito soporte.

Mediante voltamperometría cíclica se observaron cuatro señales de reducción del compuesto terpiridínico. Estas señales incrementan su intensidad al adicionar soluciones metálicas. Lo anterior confirmó que la actividad redox de los complejos Tpy-Metal se encuentra en el ligando y no en el metal coordinado. De otro lado, la membrana que contenía el complejo Tpy-Hg presentó menor resistencia eléctrica comparada con los dos complejos restantes, lo cual pudiera estar relacionado con la mayor afinidad del compuesto terpiridínico hacia ese tipo de ion metálico. Las isotermas de adsorción mostraron que el comportamiento de la membrana se ajusta al modelo de Langmuir para la adsorción de cobre y mercurio y al modelo de Peleg para zinc.

Referencias

Abhijnakrishna, R., Magesh, K., Ayushi, A., Velmathi, S. (2023). *Advances in the Biological Studies of Metal-Terpyridene Complexes: An Overview from 2012 to 2022. Coordination Chemistry Review*, 496: 215380. https://doi.org/10.1016/j.ccr.2023.215380

Efecto del tratamiento térmico sobre la microestructura y cristalinidad de hidroxiapatita obtenida de hueso cortical bovino.

Effect of heat treatment on the microstructure and crystallinity of hydroxyapatite obtained from bovine cortical bone.

Moreno, P.[1], Henao, J.[1], Hernández, D.[1]

[1]Grupo de Investigación en Química Estructural (GIQUE), Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.

pablo.moreno@correo.uis.edu.co

Área Temática: Química Analítica.

Palabras clave: Hidroxiapatita, hueso cortical, microestructura, Difracción de rayos X.

La hidroxiapatita bovina (HAB) es un material de interés que ha sido ampliamente estudiado para su aplicación en biomateriales debido a su similitud con la composición mineral del tejido óseo humano, ya que contiene iones traza como Na^{+}, Mg^{2+}, K^{+}, CO_3^{2-}, que son cruciales para los procesos de regeneración ósea. El tratamiento térmico es un paso crucial en la obtención de hidroxiapatita (HA) y puede afectar significativamente a su microestructura y propiedades, por lo que se selecciona cuidadosamente para eliminar la materia orgánica y mejorar la cristalinidad de la HA, evitando la descomposición térmica y la generación de fases secundarias en el producto final. En el presente trabajo se investigó el efecto del tratamiento térmico sobre la microestructura de la HA obtenida a partir de la calcinación de hueso cortical bovino (CB). Se realizaron ensayos de calcinación en muestras tamizadas y no tamizadas a una temperatura entre 500 °C y 1100 °C durante 4 h, utilizando una rampa de calentamiento de 5 °C/min para evaluar su impacto sobre la relación Ca/P, el tamaño de cristalito, la presencia de fases secundarias y de iones traza. Además, se caracterizó la pérdida de masa durante la calcinación y la cristalinidad del HAB obtenida por difracción de rayos X (DRX). Como resultado, se observó una pérdida de masa durante la calcinación de HC alrededor del 31,9 %, debido a la eliminación de materia orgánica. Además, se observó un aumento de la cristalinidad del HAB derivado de HC tanto en las muestras tamizadas como en las no tamizadas. Este aumento de la cristalinidad sugiere un mejor ordenamiento atómico en la estructura de la HAB, y además, se presentaron diferentes fases secundarias como el óxido de magnesio y la whitlockita a medida que aumentaba la temperatura del tratamiento térmico. Los resultados obtenidos indican que el tratamiento térmico tiene un efecto significativo en la microestructura del HAB obtenido a partir de hueso cortical bovino y que la comprensión de estas diferencias es crucial para optimizar la obtención de HAB.

Referencias

Akram, M., Ahmed, R., Shakir, I., Ibrahim, W. A. W., & Hussain, R. (2014). Extracting hydroxyapatite and its precursors from natural resources. In *Journal of Materials Science* (Vol. 49, Issue 4, pp. 1461–1475). https://doi.org/10.1007/s10853-013-7864-x

Hiller, J. C., Thompson, T. J. U., Evison, M. P., Chamberlain, A. T., & Wess, T. J. (2003). Bone mineral change during experimental heating: An X-ray scattering investigation. *Biomaterials*, *24*(28), 5091–5097. https://doi.org/10.1016/S0142-9612(03)00427-7

Análisis cualitativo de sustancias volátiles procedentes de envases plásticos destinados al contacto con alimentos en Panamá mediante Cromatografía de Gases acoplado a Espectrometría de Masas (GC-MS)

Qualitative analysis of volatile substances from plastic containers intended for contact with food in Panama using Gas Chromatography coupled to Mass Spectrometry (GC-MS)

Castillo, C.[1], Aguilar N.[1], González J.[1,2], Castillero I.[1,2], Barría F.[1,2], Ríos C.[1], Jaén J.[1,2,3]

[1]Grupo de Investigación, Innovación y Desarrollo en Química Aplicada, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

[2]Departamento de Química Analítica, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

[3]Sistema Nacional de Investigadores de Panamá (SNI), Panamá, Panamá.

Cristhopher.castillo@up.ac.pa

Área Temática: Química Analítica.

Palabras claves: Sustancias volátiles, envases alimentarios, cromatografía, polímeros, seguridad alimentaria.

Los plásticos se encuentran entre los materiales más utilizados en la fabricación de envases alimentarios. Sin embargo, durante su producción se les añade aditivos químicos, que en condiciones apropiadas pueden migrar a los alimentos, poniendo en riesgo la seguridad alimentaria. Este estudio pionero en Panamá busca desarrollar y optimizar metodologías analíticas para extraer analitos no objetivos de la matriz polimérica para su posterior identificación y cuantificación.

Para ello, se adquirieron envases plásticos de polietileno tereftalato (PET), poliestireno (PS), polietileno (PE), polipropileno (PP), y policloruro de vinilo (PVC) en el mercado local. Los envases se fragmentaron y un gramo de cada muestra fue colocada en un vial de vidrio para su posterior extracción. Se evaluaron varios disolventes para la extracción, incluyendo diclorometano (DCM), acetona, n-hexano, cloroformo, acetonitrilo y xileno. Según los resultados obtenidos, se optimizó un sistema disolvente/antidisolvente para los materiales de PVC y PS, que permite la disolución del material en DCM y posterior regeneración del polímero en etanol. En tanto que las poliolefinas fueron tratadas con DCM. Las extracciones se realizaron en un baño ultrasónico para favorecer la disolución de los compuestos. Todas las muestras fueron analizadas por triplicado y concentradas hasta 1 mL en un flujo suave de nitrógeno gaseoso.

La técnica utilizada para la identificación de los analitos fue la Cromatografía de Gases-Espectrometría de Masas (GC-MS) utilizando ionización de impacto electrónico a 70 eV y la adquisición de los datos se realizó en modo SCAN. Los espectros obtenidos fueron comparados con la biblioteca de espectros de masas del Instituto Nacional de Estándares y Tecnología (NIST) para confirmar la presencia de migrantes potenciales.

Con una coincidencia arriba del 80% se detectó la presencia de compuestos, como: etilbenceno, estireno, hidroxitolueno butilado, 1 etil-2-metilbenceno, 1,3-dimetilbenceno, Naftaleno, decametilciclopentasiloxano, ftalato de bis(2-etilhexilo), entre otros, que incluyen aditivos plásticos, monómeros residuales y subproductos de degradación.

Este estudio proporciona una metodología efectiva para la extracción e identificación de sustancias migrantes de envases plásticos hacia los alimentos. Además, establece una base para futuras investigaciones, resaltando la importancia de monitorear y evaluar los riesgos para la salud asociados a estas sustancias.

Referencias

Aznar, M., Ubeda, S., Dreolin, N., & Nerín, C. (2019). Determination of non-volatile components of a biodegradable food packaging material based on polyester and polylactic acid (PLA) and its migration to food simulants. Journal of Chromatography A, 1583, 1-8. https://doi.org/10.1016/j.chroma.2018.10.055

Su, Q.Z., Vera P., Van de Wiele, C., Nerín, C., Lin, Q.B., & Zhong, H.N. (2019). Non-target screening of (semi-) volatiles in food-grade polymers by comparison of atmospheric pressure gas chromatography quadrupole time-of-flight and electron ionization mass spectrometry. Talanta, 202, 285-296. https://doi.org/10.1016/j.talanta.2019.05.029

Fabricación y modificación de electrodos serigrafiados con PEDOT-Cu sintetizado químicamente para la detección de glifosato

Manufacture and modification of silkscreened electrodes with chemically synthesized PEDOT-Cu for glyphosate detection

Rodríguez, M.[1], Sandoval, A.[1]

[1]Grupo de Investigación de Electroquímica y Termodinámica Computacional, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

marrodriguez@unal.edu.co

Área Temática: Química Analítica.

Palabras clave: Síntesis PEDOT-Cu, caracterización electroquímica, área electroactiva, electrodos de papel, complejo glifosato cobre.

Se fabricaron dispositivos electroquímicos de tres electrodos en papel y en acetato usando la técnica de serigrafía y se modificaron con poli(3,4-etilendioxitiofeno) con cobre (PEDOT-Cu) con el fin de detectar glifosato.

El PEDOT-Cu se sintetizó químicamente en una reacción de un solo paso en dos fases (acetonitrilo/n-hexano). El compuesto obtenido se caracterizó por medio de espectroscopía FTIR, DRX, SEM y EDX confirmándose tanto la polimerización como la presencia de cobre.

Los electrodos serigrafiados en papel se caracterizaron mediante las técnicas de voltamperometría cíclica y cronocoulombimetría en disoluciones de ferricianuro 1 mM en KCl 0,1 M, obteniéndose áreas electroactivas de A_{CV}=0,161 ± 0,018 cm^2 y A_{CC}=0,163 ± 0,026 cm^2, respectivamente; todas las áreas electroactivas obtenidas fueron mayores al área geométrica.

Al caracterizar el comportamiento de los electrodos modificados y no modificados por espectroscopía de impedancia electroquímica en ferrocianuro/ferricianuro de potasio 1mM en KCl 0,1M se encontró que los electrodos serigrafiados en papel presentaron una menor resistencia a la transferencia de carga que los de acetato, pero cuando se modificaron con PEDOT-Cu su comportamiento no tiene diferencias representativas. Los espectros de los electrodos sin modificar se ajustan a un circuito pseudo-Randles, y, cuando ya se modifican, presentan un comportamiento de un circuito Randles que incluye la impedancia de Warburg correspondiente al proceso de difusión de las especies de hierro, lo cual indica que la presencia del polímero conductor disminuye la resistencia a la transferencia de carga.

Finalmente, los electrodos modificados se evaluaron frente a soluciones de glifosato y se observó un aumento en la corriente de pico anódica debido al complejo formado entre el glifosato y el cobre. Esta señal aumentó a medida que se aumentó la concentración del glifosato lo que indica que los electrodos pueden ser implementados para determinar y cuantificar glifosato.

Referencias

Wang, Y., Cai, K., Chen, S., Shen, S. y Yao, X. (2014). One-step interfacial synthesis and thermoelectric properties of Ag/Cu-poly(3,4-ethylenedioxythiophene) nanostructured composites. J Nanopart Res, 16(2531), 2-9. https://doi.org/10.1007/s11051-014-2531-y

Deroco, P.; Junior, D. y Kubota, L. (2021). Silver Inkjet-Printed Electrode on Paper for Electrochemical Sensing of Paraquat. Chemosensors, 9(4), 2-13. https://doi.org/10.3390/chemosensors9040061

Validación del método de análisis de metales en granos por espectrometría de emisión atómica con plasma acoplado inductivamente (ICP-OES), Provincia de Panamá, República de Panamá.

Validation of an analytical method for the analysis of metals in grains by inductively coupled plasma atomic emission spectrometry (ICP-OES), Province of Panama, Republic of Panama.

Mojica Rodríguez, M[1]., De León, D[1]., Checa B.[2]., Quesada, K[2]

[1]Escuela de Química, Facultad de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad Autónoma de Chiriquí.

[2]Departamento de análisis químico, Laboratorio de Control de Plaguicidas y Fertilizantes, Ministerio de Desarrollo Agropecuario.

milka.mojica@unachi.ac.pa

Área Temática: Química Analítica.

Palabras Clave: Fiabilidad, Precisión, Contaminación, Parámetros, Cuantificación.

En este estudio se llevó a cabo la validación de un método de análisis en granos por ICP-OES para uso del laboratorio de análisis químico, MIDA. Este proceso asegura que los resultados obtenidos sean fiables y aceptados tanto por los clientes como por los organismos reguladores, y promueve una cultura de mejora continua y excelencia operativa dentro del laboratorio. Es por ello, la importancia de tener la mayoría de métodos validados para dar fiabilidad y precisión a los ensayos del laboratorio. La espectrometría de emisión atómica con plasma acoplado inductivamente es un método sencillo y rápido que permite la cuantificación de los metales en un tiempo estimado corto siendo una herramienta importante para este trabajo de investigación. Se determinó una longitud de onda específica para cada metal ya que es fundamental para asegurar la especificidad, sensibilidad y precisión del análisis. Esta técnica analítica permite minimizar las interferencias espectrales y optimizar el rango dinámico. Con lo cual los metales analizados fueron: As (188.980 nm), Cd (214.439 nm), Co (228.615 nm), Cu (327.395 nm), Mo (202.032 nm), Pb (220.353 nm) y Zn (202.548 nm). Siguiendo el instructivo de validación del laboratorio se evaluaron los siguientes parámetros: límite de detección en el cual se obtuvo: LD del: arsénico: 0,23 mg/Kg, Cadmio: 0.02 mg/Kg, Cobalto: 0.04 mg/Kg, Cobre: 2.18 mg/Kg, Molibdeno: 0.34 mg/Kg, Plomo: 0.46 mg/Kg, Zinc: 1.07 mg/Kg, límite de cuantificación, repetibilidad, linealidad, Precisión Intermedia, Veracidad, Robustez, los mismos fueron evaluados a través de materiales de referencia (MR) y un blanco (muestra de granos libre de metales). Finalmente se demostró el cumplimiento de los parámetros de validación comprobándose de esta forma la validez del método analítico y su aplicación en análisis de granos. Por otro lado, la cuantificación de metales permite controlar la presencia de metales para prevenir la contaminación ambiental y garantizar la sostenibilidad del sector agropecuario.

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Referencias

EURACHEM. (2016). La adecuación al uso de métodos analíticos. Una guía de laboratorio para validación de métodos y temas relacionados. Segunda Edición. https://www.eurachem.org/images/stories/Guides/pdf/MV_guide_2nd_ed_ES.pdf

Gonzales, L. (17 de julio de 2019). *Qse Academy*. Obtenido de Method Validation: https://www.qse-academy.com/es/finalidad-de-la-validacion-de-metodos-de-iso-17025/

Determinación de iones en aguas termales de la región cafetera de Colombia mediante cromatografía de intercambio iónico

Determination of ions in thermal waters of the coffee region of Colombia by ion exchange chromatography

Marín-Giraldo Y.[1], Correa-Navarro Y.M.[1], Murcia-García J.D.[1], Rivera-Giraldo J.D.[1]
[1]Grupo de Investigación en Estudios Ambientales en Agua y Suelo, Universidad de Caldas, Manizales, Colombia.

yelicza.marin@ucaldas.edu.co

Área Temática: Química Analítica.
Palabras clave: Parámetros cromatográficos, validación, separación, identificación.

El agua es un recurso natural indispensable para la vida y el sostenimiento de los ecosistemas. Entre los distintos tipos de aguas, aquellas que emanan a la superficie con una temperatura 5°C más alta que la temperatura superficial, proceden de capas subterráneas y por lo general son ricas en diferentes componentes minerales, son llamadas aguas termales, estas son valiosas para las ciencias geotérmicas, las industrias turísticas y cosmética. Dado el uso de estas aguas, diferentes estudios destacan la importancia de determinar las características fisicoquímicas de las aguas termales. Hasta ahora, los análisis de estas aguas se han centrado en técnicas espectroscópicas y volumétricas. Lo anterior ha expuesto la necesidad de implementar metodologías analíticas de mayor eficiencia, que permitan detectar analitos, tales como iones, dentro de los cuales se puede mencionar: fluoruro, cloruro, nitrito, nitrato, sulfato, fosfato, calcio, magnesio, sodio y potasio. Lo que condujo a realizar este estudio, en el cual se busca establecer una metodología para la separación, detección y cuantificación de iones en aguas termales mediante cromatografía iónica.

Para la investigación, las muestras de agua termal se obtuvieron en los departamentos del eje cafetero colombiano. Antes de inyectarse al cromatógrafo, las muestras fueron desgasificadas, filtradas y diluidas. Para el análisis, se empleó un cromatógrafo de intercambio iónico (Thermo Scientific), en el cual se trabajaron distintos métodos cromatográficos hasta establecer las condiciones óptimas para la separación de aniones y cationes en las muestras de estudio. Los métodos cromatográficos fueron validados según las normativas de la Agencia de Protección Ambiental-EPA, por sus siglas en inglés. Además, se determinaron una serie de parámetros analíticos, como sensibilidad, linealidad, precisión, exactitud y límites de detección y cuantificación, que permitieron evaluar la idoneidad del método analítico utilizado.

Finalmente, los análisis cromatográficos permitieron establecer que los iones cloruro, sulfato, calcio, magnesio y sodio fueron los de mayor presencia en las aguas termales analizadas, pero la concentración de estos fue variable; lo cual se asocia con la estructura geológica y la actividad hidrogeológica de la región.

Referencias

Cardona-Castaño, Julio-Andrés, Juan-David Rivera-Giraldo, and Fernando-Antonio Chávez-Vallejo. 2023. "Desarrollo de Un Método Analítico Por Cromatografía Iónica Para La Cuantificación de Aniones En Aguas Residuales de Origen Minero." *Revista Científica* 46(1):122–33. doi: 10.14483/23448350.19427.

Gov, Www Epa. 2018. *Office of Water Protocol for Review and Validation of New Methods for Regulated Organic and Inorganic Analytes in Wastewater Under EPA's Alternate Test Procedure Program.*

Michalski, Rajmund, Paulina Pecyna-Utylska, and Joanna Kernert. 2021. "Determination of Ammonium and Biogenic Amines by Ion Chromatography. A Review." *Journal of Chromatography A* 1651:462319. doi: 10.1016/j.chroma.2021.462319.

Determinación de las fracciones f libre de retroceso en ferritas $CuFe_2O_4$ mediante espectroscopía Mössbauer

Determination of the recoilless f-fractions in $CuFe_2O_4$ ferrites using Mössbauer spectroscopy

Eduardo Chung[1,2], Juan Antonio Jaén[1,3]
[1]Grupo de Investigación de Materiales, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.
[2]Departamento de Física, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.
[3]Departamento de Química Física, Panamá, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.
eduardo.chungng@up.ac.pa

Área Temática: Química Física.
Palabras clave: Ferrita de cobre, grado de inversión, Espectroscopía Mössbauer.

$CuFe_2O_4$ pertenece a la familia de las ferritas con estructura de espinela del tipo MFe_2O_4, en donde M es un catión metálico divalente. Estos materiales han demostrado ser muy interesantes desde puntos de vista fundamentales y aplicados. La fórmula química general de esta familia de materiales se puede escribir como as $(Cu^{2+})_{1-x}(Fe^{3+})_x(Cu^{2+})_x(Fe^{3+})_{2-x}O_{42}^-$, $(0 \leq x \leq 1)$, en donde los paréntesis () representan los cationes que ocupan sitios tetraédricos A, mientras que los corchetes [] representan los cationes que ocupan sitios octaédricos B en la estructura de espinela. El valor de x da la fracción de sitios tetraédricos ocupados por cationes Fe^{3+}, se llama grado de inversión.

Preparamos este material utilizando un método de estado sólido asistido con molienda de bolas de baja energía. Se concluyó que el $CuFe_2O_4$ tetragonal puro sintetizado es prácticamente una estructura de espinela completamente inversa. En el cálculo, la relación del factor f sin retroceso a temperatura ambiente, f_A/f_B, para los cationes Fe^{3+} en los sitios (A) y [B] se utilizó en un valor de 1.32, entre varias opciones de la literatura. f_i es la probabilidad de emisión o absorción resonante de radiación gama sin retroceso (factor de Debye-Waller). Dado que el área espectral del espectro Mössbauer de ^{57}Fe, A_i, es proporcional al producto del número de átomos de hierro de ^{57}Fe y f_i ($A_i = Cf_i$), el conocimiento simultáneo de los factores relativos f_i y las áreas del espectro Mössbauer, permite calcular factores atómicos o de peso. de los iones de Mössbauer presentados en un sitio de un compuesto (o en cada compuesto en una mezcla de varios compuestos). Se utilizó un método directo para calcular simultáneamente dos factores f sin retroceso de cualquier compuesto que contenga hierro en relación con el de un material de referencia (hierro metálico) recopilando espectros Mössbauer a una sola temperatura. Al suponer una estructura de espinela completa (x = 1), la relación del factor f sin retroceso calculada $f_A/f_B = 1.30 \pm 0.18$, lo que confirma la validez de nuestros hallazgos, el $CuFe_2O_4$ sintetizado es una espinela completamente invertida.

Referencias

Jaén, J.A. et al. (2024) Structural and electrochemical characterization of tetragonal copper ferrite nanoparticles. Hyperfine Interact 245, 4 (2024). https://doi.org/10.1007/s10751-024-01848-7

Kohout, J. et al. (2016), $CuFe_2O_4$ thin films: Hyperfine interactions of ^{57}Fe nuclei and distribution cations, Int. Conf. Appl. Phys. Condens. Matter 22, 279-283.

La sinergia de Microsoft Excel y la Química Física: Soluciona la ecuación de Van Der Waals con eficiencia

The synergy of Microsoft Excel and Physical Chemistry: Solve the Van Der Waals equation efficiently

Abrego, K.[1], Camargo, K.[1], Cascante, F.[1], Cornejo, A.[1], Díaz, Y. [1], González, J.[1], Jiménez, J.[1], López, I. [1], Márquez, K. [1], Meza, M. [1], Pérez, Y. [1], Lezcano, R. [2].

[1]Estudiante de Licenciatura en Tecnología Química Industrial, Escuela de Química, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

[2]Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología Universidad de Panamá, Panamá, Panamá.

Área Temática: Química Física.

Palabras clave: Gases, ecuación de Van Der Waals.

Al intentar predecir el comportamiento de un gas real usando la teoría del gas ideal se observan grandes desviaciones que hacen obsoleto este modelo. Con el fin de predecir mejor el comportamiento de estos gases se han diseñado nuevos modelos que corrigen las desviaciones que presenta la teoría del gas ideal, uno de estos modelos es la ecuación de *Van Der Waals*. Este modelo es capaz de predecir con mayor exactitud el comportamiento de un gas real, aunque el cálculo de alguna de sus variables como la cantidad de sustancia y volumen, resulta un poco complejo y tardado, cuando se maneja un abultado flujo de datos, es por esto por lo que se planteó el desarrollo de una hoja calculo que optimice este proceso con el fin centrarse mayormente en el análisis de datos y toma de decisión.

Con el alto manejos de tablas de constantes para cada gas, conversión de unidades y selectores de opción múltiple, el equipo se apoyó en la conocida I.A., *chat GPT* para la determinación de la sintaxis de las fórmulas que manipularían los datos. El resultado fue una hoja de cálculo donde es posible la inserción de las variables conocidas y la determinación inmediata de la incógnita, además la hoja de cálculo es capaz de realizar conversiones de unidades diferentes a las del sistema internacional (En las que opera) tanto en la sección de inserción de datos como en la entrega de resultado y presenta la posibilidad de elegir entre una amplia gama de gases.

Los fundamentos y habilidades aplicados en el desarrollo de esta hoja de cálculo pueden ser aplicados en la optimización del uso de otros modelos matemáticos en ambientes donde se requiera un rápido de manejo de datos y emisión de respuesta, entornos bastante comunes en el área industrial, es aquí donde encontramos una sinergia en la utilización de las hojas de cálculo con la química física.

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Síntesis de complejos de coordinación derivados de ligandos azólicos con potencial actividad anti-*plasmodium*

Synthesis of coordination complexes derived from azole ligands with potential anti-*plasmodium* activity

Patiño S.[1], Macías M.[2], Ezenarro D.[1], Hurtado J.[1]

[1]Química Inorgánica, Catálisis y Bio-Inorgánica. Departamento de Química. Universidad de los Andes. Bogotá, Colombia.

[2]Cristalografía y Química de Materiales. Departamento de Química. Universidad de los Andes. Bogotá, Colombia.

s.patinoc@uniandes.edu.co

Área Temática: Química Inorgánica.

Palabras clave: Complejos de coordinación, actividad anti-*plasmodium*, metales, ligandos.

La malaria, también conocida como paludismo, es una enfermedad transmitida por mosquitos del género *Anopheles* que causa cientos de miles de muertes anuales, principalmente en regiones tropicales y subtropicales. Aunque se han logrado avances en prevención y tratamiento, sigue siendo una amenaza persistente para millones de personas en todo el mundo. Investigación en este campo implica un estudio que combina la síntesis química, la evaluación biológica y la optimización de la actividad farmacológica, para desarrollar compuestos que sean selectivos contra el plasmodium causante de la malaria sin dañar las células huésped. Los compuestos azólicos han demostrado potencial actividad en esta área junto a la formación de complejos de coordinación como cobalto, cobre y zinc.

La síntesis de los ligandos en este trabajo se llevó a cabo en atmósfera inerte mediante el método Schlenk empleando reflujo y agitación de una mezcla **A** de 2,6-dicloropiridina con terbutóxido de potasio o metóxido de sodio (de acuerdo al ligando objetivo) y una mezcla **B** del correspondiente azol (imidazol, triazol, benzotriazol) (de acuerdo al ligando objetivo) con NaH (hidruro de sodio) para combinarlos mediante cánula. Para los complejos se hace reaccionar la sal metálica correspondiente ($CoCl_2$, $CuCl_2$, $ZnCl_2$) en agitación y reflujo con los ligandos obtenidos.

Los ligandos y complejos fueron obtenidos con rendimientos que varían del 65% al 80%. Mediante análisis de difracción de rayos-X de monocristal se pudo corroborar la estructura. También fueron usadas las técnicas de: RMN, HRMS, FTIR, Uv-Vis, TGA, Análisis Elemental y Raman que permitieron la caracterización de los compuestos obtenidas y su estabilidad a lo largo de ciertos tiempos. Estudios anti-plasmodium actualmente se están llevando a cabo.

Referencias

Cameron, A., Read, J., Tranter, R., Winter, V. J., Sessions, R. B., Brady, R. L., Vivas, L., Easton, A., Kendrick, H., Croft, S. L., Barros, D., Lavandera, J. L., Martin, J. J., Risco, F., García-Ochoa, S., Gamo, F. J., Sanz, L., Leon, L., Ruiz, J. R., . . . De las Heras, F. G. (2004). Identification and Activity of a Series of Azole-based Compounds with Lactate Dehydrgenase-directed Anti-malarial Activity. *Journal Of Biological Chemistry/The Journal Of Biological Chemistry*, *279*(30), 31429-31439. https://doi.org/10.1074/jbc.m402433200

Brenda, C., Norma, R., Marcela, R., Nelly, L., & Teresa, F., I. (2022). Action mechanisms of metallic compounds on Plasmodium spp. *Journal Of Trace Elements In Medicine And Biology*, *73*, 127028. https://doi.org/10.1016/j.jtemb.2022.127028

Desarrollo de Aplicación para Solucionar la Ecuación De Van Der Waals Asistida por un Modelo de Lenguaje

Development of an Application to Solve the Van Der Waals Equation Assisted by a Language Model

Samaniego, Sara[1], Trejos, Leopoldo[1], Madrid, Melanie[1], Bustos, Durley[1], De La Hoz, Fernanda[1], Hernández, Anibal[1], Pérez, Juan[1], Cooper, Justin[1], Mosquera, Evelyn[1], Arcia, Katiuska[1], Díaz, Sofía[1], García, Lirieth[1], Lezcano, Ritzela[2]

[1]Universidad de Panamá, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Escuela de Química.
[2]Universidad de Panamá, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología, Departamento de Química Física.

anibal.hernandez@up.ac.pa, Evelyn.mosquera@up.ac.pa

Área Temática: Química Física Computacional

Palabras Clave:
Ecuación de Van der Waals, Python, Gases Reales, Interacciones Moleculares, Termodinámica.

Resumen:
La ecuación de Van der Waals modifica la ecuación de estado del gas ideal al considerar el volumen de las moléculas y las interacciones entre ellas. Este proyecto tiene como objetivo desarrollar una plantilla en Python creando algoritmos para automatizar los cálculos de variables como presión, temperatura y volumen molar en gases reales. Se selecciono una lista de gases comunes con sus constantes "a", "b" y masa molar, permitiendo que el programa calcule los resultados tras ingresar datos como masa, volumen y temperatura. La plantilla en Python fue programada para aceptar los valores de los gases y sus constantes, permitiendo que los usuarios ingresen las condiciones iniciales, y el código resuelve la ecuación de Van der Waals despejando las variables correspondientes. Además, el programa valida los datos ingresados, alertando de errores cuando el gas no está en la lista predefinida. Se verificó la precisión del programa comparando los resultados obtenidos con datos teóricos (Engel, Reid, & Hecht, 2018).
El código demostró ser eficaz para calcular las variables de presión, volumen y temperatura, obteniendo resultados consistentes y fiables. La automatización de estos cálculos, que tradicionalmente son largos y susceptibles a errores humanos, mostró un ahorro significativo de tiempo y esfuerzo, especialmente en escenarios con gases reales y condiciones no ideales. La implementación del programa demuestra el potencial del uso de software computacional en el campo científico, permitiendo obtener resultados precisos de manera rápida y eficiente.

Referencias:

- Turbo Código. (2020, 15 junio). 😎😱😉*Python tkinter 02. Posicionando controles en una ventana*😎😱😉[Vídeo]. YouTube. https://www.youtube.com/watch?v=y69rqjEfwYI
- Engel,T., Reid, P., & Hecht, J. (2018). *Física Química* (7ª ed.). Pearson.

Síntesis y Caracterización de $[Ag_2(DDTC)(Sac)]_n$
Synthesis and characterization of $[Ag_2(DDTC)(Sac)]_n$

Ceroni, M.[1] y K. Otsuka, K.[1]
[1]Departamento de Química Inorgánica, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Calle German Amézaga 375, Lima, Perú

mceronig@unmsm.edu.pe

Área Temática: Química Inorgánica.
Palabras clave: sacarinato, plata, dietilditiocarbamato.

Según Hogarth (2012) los ditiocarbamatos son ligandos muy versátiles, son derivados del ácido ditiocarbámico $R_2NC(S)$-SH y de acuerdo con Odularu y Ajibade (2019) tienen importantes aplicaciones en la industria química, farmacia, ciencia de materiales, síntesis química, agroquímica, química radiofarmacéutica y también biológica.

El nuevo complejo mixto de plata(I) se sintetizó por mezcla de nitrato de plata, sacarinato de sodio (SacNa) y dietilditiocarbamato de sodio (DDTC) en una proporción de 2:1:1, respectivamente, en medio DMF. El precipitado obtenido se desecó durante 48 horas. El compuesto obtenido se caracterizó mediante espectroscopía FT-IR (cm^{-1} 2973, 289,31, 1651, 1626, 1585, 1495) espectrometría de masas Maldi positivo (m/z 620.9, 875.8, 909.7, 1132.7, 1166.6), XPS y análisis elemental (% C 26.00, H 2.64, N 5.13, S 17,30).

Los resultados del análisis elemental reflejan la buena correlación 2:1:1 entre la plata y los ligandos Sac y DDTC, así como la ausencia de disolvente. Asimismo, a partir del espectro de masas Maldi obtenido se pudieron identificar las señales correspondientes a los aniones Sac^- y $Ag(Sac)_2^-$, así como los cationes $Ag_3(DDTC)_2^+$, entre otros. La gran presencia de cationes tipo $Ag_x(DDTC)_y$ sugiere que DDTC es muy estable formando largas cadenas con plata, mientras que la presencia de $Ag(Sac)_2^-$, indicaría que este anión podría estar actuando como puente entre estas cadenas. Además, el análisis FTIR y XPS muestra la coordinación del azufre del ditiocarbamato y del nitrógeno y oxígeno de la sacarina a la plata que se encuentra en estado de oxidación (I). Los datos espectroscópicos indican la obtención del compuesto polimérico $[Ag_2(DDTC)(Sac)]_n$

Referencias

Hogarth, G. (2012). Metal-dithiocarbamate complexes: chemistry and biological activity. *Mini-Reviews in Medicinal Chemistry*, *12*(12), 1202–1215. https://doi.org/10.2174/138955712802762095

Odularu, Ayodele T., Ajibade, Peter A. (2019). Dithiocarbamates: Challenges, Control, and Approaches to Excellent Yield, Characterization, and Their Biological Applications, *Bioinorganic Chemistry and Applications*, 8260496, 1-15. https://doi.org/10.1155/2019/8260496

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

36º CLAQ
PANAMÁ
2024
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Reconocimientos Finales

Entrega de reconocimientos

Durante la clausura del XXXVI Congreso Latinoamericano de Química, que tuvo lugar el viernes 4 de octubre, el presidente del congreso, MSc. Víctor Acevedo, entregó un reconocimiento especial a los principales miembros del comité organizador. Este reconocimiento fue una muestra de agradecimiento por su destacada participación y el esfuerzo incansable que demostraron en la organización del evento. La ceremonia de clausura fue un momento emotivo, donde se resaltó la importancia del trabajo en equipo y la dedicación de cada miembro para el éxito del congreso.

Entrega de reconocimiento a Brenda Checa (Presidenta de Copaqui)

Entrega de reconocimiento a Ritzela Lezcano (Presidenta del Comité Científico)

Entrega de reconocimiento a Jacqueline Jones (Vicepresidenta del Comité Científico)

Entrega de reconocimiento a Luisa Casis (Presidenta del CEQui)

Entrega de reconocimiento a Yomairy Aikman (Vicepresidenta del CEQui)

La Federación Latinoamericana de Asociaciones Químicas (FLAQ) está conformada por los presidentes de cada una de las asociaciones y sociedades afiliadas, así como por su consejo directivo. En esta ocasión, se aprovechó la oportunidad para reconocer el sobresaliente desempeño del consejo directivo correspondiente al periodo 2022-2024. Este reconocimiento destaca la dedicación y el esfuerzo continuo de sus miembros, quienes han trabajado incansablemente para promover el avance de la química en la región latinoamericana, fomentando la colaboración y el intercambio de conocimientos entre profesionales del área.

Entrega de reconocimiento a Jorge Cardoso Messeder (Presidente FLAQ)

Entrega de reconocimiento a Harold Duban Ardila (Pasado Presidente)

Entrega de reconocimiento a Flora de Maria Sosa (Tesorera)

Agradecimiento
Olga R. Lock

Olga R. Lock Sing Vda. de Ugaz

Olga R. Lock Sing nació en la Provincia de Cañete, Departamento de Lima. Se tituló de Ingeniero Químico en la Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Facultad de Química e Ingeniería Química (1962), luego realizó estudios de la Maestría en Química en el Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey, ITESM, de Nuevo León, México (1968) y en el 2003 obtuvo el Doctorado en Ciencias Químicas por la Pontificia Universidad Católica del Perú dentro de un Programa para Profesores de Trayectoria Académica Reconocida.

Durante poco más de cuatro décadas ha participado en actividades de promoción y difusión de la química de productos naturales en el país y en el extranjero, debido a ello fue su nombramiento como Coordinadora Internacional de la Red Iberoamericana de Productos Naturales de Uso Medicinal del Programa CYTED (1990-1997), Presidenta de la Federación Latinoamericana de Asociaciones Químicas, FLAQ, entre los años 2000 y 2002 y la Secretaría Ejecutiva de la misma desde el 2006 al 2024, su participación en diferentes Congresos de Química y de Productos Naturales en el país y en el extranjero (Argentina, Brasil, Colombia, Cuba, Chile, España, Italia, Japón, México, Puerto Rico, Panamá, Paraguay, Uruguay y Suiza), ya sea como Conferencista, con la presentación de los resultados de sus investigaciones, o como miembro de Comité Organizador. Estas participaciones le han dado la oportunidad de compartir con laureados Premios Nobel, así como con representantes de la IUPAC, de la American Chemical Society, ACS, y de las diferentes Sociedades Químicas de América Latina. Dentro del Perú ha ofrecido alrededor de un centenar y medio de conferencias científicas en instituciones de investigación, centros universitarios y colegios profesionales, entre otros.

En nombre de la Federación Latinoamericana de Asociaciones Químicas (FLAQ), queremos expresar nuestro más profundo agradecimiento por tus años de servicio ejemplar como Secretaria Ejecutiva. Desde tu llegada en 2006 hasta tu retiro en 2024, tu dedicación, profesionalismo y compromiso han sido fundamentales para el crecimiento y éxito de nuestra organización. Tu arduo trabajo y pasión han dejado una huella imborrable, y siempre serás recordada con gran aprecio y admiración. Con tu nueva designación como Presidenta Honoraria de FLAQ, sabemos que contaremos con tu apoyo en las distintas actividades que se realizarán. Te deseamos todo lo mejor y esperamos que continúes cosechando éxitos.

Con gratitud y admiración,

Víctor E. Acevedo Ch.
Presidente FLAQ
2024-2026

Entrega de reconocimiento a Olga R. Lock (Secretaria Ejecutiva)

Miembros de la FLAQ durante la clausura del CLAQ 2024.

36° CLAQ PANAMÁ 2024

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Anexos

Programa Exposiciones Orales

Congreso Latinoamericano de Química 2024

Programa Oficial

V Congreso Estudiantil de Química 2024

COLEGIO PANAMEÑO DE QUÍMICOS 1974

50 AÑOS 1974 - 2024

36° CLAQ PANAMÁ 2024

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Construyendo Puentes Químicos en América Latina

Lunes 30 COLIBRÍ BLANCO

8:00 – 8:15 8:15 – 8:40 8:40 – 9:05 9:05 – 9:30	**Registro de participantes**
9:30 - 9:55	**Uso de la espectroscopia de Mössbauer en el control de calidad de suplementos terapéuticos antianémicos que contienen hierro** Juan Jaén - Universidad de Panamá
9:55 - 10:20	**Evaluación Biológica de Extractos Orgánicos de *Emilia fosbergii*** María Pilar De Jesús Bernal Roper - Universidad de Panamá
10:20 - 11:00	**Coffee Break**
11:00 - 11:25	**Diseño y síntesis química de un análogo de los inhibidores de la HMG-CoA reductasa (estatinas) mediante QSAR** Manuel Andres Blanco Niño - Universidad El Bosque, Colombia
11:25 - 12:25	**Conferencia Magistral - Efectos de múltiples estresores agrícolas sobre el funcionamiento de ecosistemas fluviales tropicales: Hallazgos recientes y aplicaciones ecotoxicológicas desde el Lab-ECOTOX** Dra. Aydee Cornejo - Instituto Conmemorativo Gorgas, Panamá Salón principal
12:25 - 14:00	**Almuerzo - libre**
14:00 - 14:25	**Mejora del comportamiento térmico de aceite de oliva virgen extra adicionado con extractos vegetales naturales** Marcos Flores - Universidad de Talca - Campus Lircay, Chile
14:25 - 14:50	**Cinética de Inactivación de Polifenoloxidasa en frutos Rubus glaucus, tratados con ácido ascórbico y cloruro de calcio** Dolffi Rodríguez Campos - Universidad Abierta y a Distancia (UNAD), Colombia.
14:50 - 15:50	**Conferencia Magistral - Química de materiales y nanotecnologías** Dra. Luisa Whittaker-Brooks - Universidad de Utah - USA Salón principal
15:50 - 16:15	**Receso**
16:15 - 16:40 16:40 - 17:05 17:05 - 17:30 17:30 - 17:55 17:55 - 18:20	**Ceremonia de Inauguración** Dra. Elida De Obaldia - Universidad Tecnológica de Panamá Dr. Rolando Gittens - ITSE Panamá Dr. Rafael Vásquez - Florida State University Salón principal

Lunes 30 COLIBRÍ VIOLETA 5

8:00 – 8:15	Registro de participantes
8:15 – 8:40	
8:40 – 9:05	
9:05 – 9:30	
9:30 - 9:55	Producción de biomasa y evaluación de crecimiento celular de microalgas del género Chlorella y Scenedesmus para su implementación en ensayos biostimulantes ante semillas de referencia Miguel Vega - Universidad Autónoma de Chiriquí, Panamá
9:55 - 10:20	Electroquímica de óxidos de hierro tipo ferritas y perovskitas para aplicaciones tecnológicas Griselda Caballero de Sánchez - Universidad de Panamá, Panamá
10:20 - 11:00	Coffee Break
11:00 - 11:25	Adsorción de nitratos y nitritos utilizando arcillas organofilicas como adsorbentes María del Rosario Sun Kou - Pontificia Universidad Católica del Perú, Perú
11:25 - 12:25	Conferencia Magistral - Efectos de múltiples estresores agrícolas sobre el funcionamiento de ecosistemas fluviales tropicales: Hallazgos recientes y aplicaciones ecotoxicológicas desde el Lab-ECOTOX Dra. Aydee Cornejo - Instituto Conmemorativo Gorgas, Panamá Salón principal
12:25 - 14:00	Almuerzo - libre
14:00 - 14:25	Desarrollo de sensores impresos y biosensores electroquímicos basados en composites epoxi-grafitos conductores Abel Balbin - Universidad de La Habana, Cuba
14:25 - 14:50	Niveles de Trihalometanos y Ácidos Haloacéticos en Aguas de Piscinas y su Asociación con Parámetros de Calidad del Agua Leonardo Beltrán Angarita - Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia
14:50 - 15:50	Conferencia Magistral - Química de materiales y nanotecnologías Dra. Luisa Whittaker-Brooks - Universidad de Utah - USA Salón principal
15:50 - 16:15	Receso
16:15 - 16:40	Ceremonia de Inauguración Dra. Elida De Obaldia - Universidad Tecnológica de Panamá Dr. Rolando Gittens - ITSE Panamá Dr. Rafael Vásquez - Florida State University Salón principal
16:40 - 17:05	
17:05 - 17:30	
17:30 - 17:55	
17:55 - 18:20	

Lunes 30 COLIBRÍ VIOLETA 1

8:00 – 8:15	Registro de participantes
8:15 – 8:40	
8:40 – 9:05	
9:05 – 9:30	
9:30 - 9:55	Defensas antioxidantes endógenas en jóvenes adultos de la República de Panamá Cecilia I. Díaz V. - Universidad de Panamá, Panamá
9:55 - 10:20	Análisis de la variación geográfica de los componentes en el veneno del escorpión Centruroides bicolor Octavio A. Samudio C. - Universidad de Panamá, Panamá
10:20 - 11:00	Coffee Break
11:00 - 11:25	Estudio Biofísico del Mecanismo de Acción del Péptido NA-CATH-ATRA-1-ATRA- 1 en Modelos de Membrana Plasmática Marcela Manrique Moreno - Universidad de Antioquia, Colombia
11:25 - 12:25	Conferencia Magistral - Efectos de múltiples estresores agrícolas sobre el funcionamiento de ecosistemas fluviales tropicales: Hallazgos recientes y aplicaciones ecotoxicológicas desde el Lab-ECOTOX Dra. Aydee Cornejo - Instituto Conmemorativo Gorgas, Panamá Salón Principal
12:25 - 14:00	Almuerzo - libre
14:00 - 14:25	Análisis cinético de metano y propiedades fisicoquímicas de bioles, generados por biodigestión anaeróbica de excretas en biodigestores de membrana Jairo Enrique Granados - Universidad de Cundinamarca, Colombia
14:25 - 14:50	Evaluación de la residualidad de contaminantes orgánicos persistentes y metales en frutas tropicales de La Unión, Antioquía, Colombia Jovan Mateus Castañeda Vargas - Universidad de Antioquía, Colombia
14:50 - 15:50	Conferencia Magistral - Química de materiales y nanotecnologías Dra. Luisa Whittaker-Brooks - Universidad de Utah - USA
15:50 - 16:15	Receso
16:15 - 16:40	Ceremonia de Inauguración Dra. Elida De Obaldia - Universidad Tecnológica de Panamá Dr. Rolando Gittens - ITSE Panamá Dr. Rafael Vásquez - Florida State University Salón principal
16:40 - 17:05	
17:05 - 17:30	
17:30 - 17:55	
17:55 - 18:20	

Martes 1 COLIBRÍ VIOLETA 1

8:00 – 8:15	Registro de Participantes
8:15 – 8:40	Las 2-aril-4-metilquinazolinas como precursores valiosos en el desarrollo de nuevos híbridos moleculares quinazolina-quinazolin-4-ona. Síntesis, caracterización y predicción de sus propiedades farmacocinéticas Diana Rocío Vera Alarcón - Universidad Industrial de Santander, Colombia
8:40 – 9:05	Síntesis one-pot tipo dominó de (E)-2-aril-4-estirilquinazolinas a partir de la 2'-aminoacetofenona Geraldine Álvarez - Universidad Industrial de Santander, Colombia
9:05 – 10:05	Conferencia Magistral - Lenguajes científicos y lectura comprensiva en química: relaciones necesarias para la equidad social Dra. Sandra Rojas - Universidad de Santiago de Chile Salón principal
10:05 - 10:30	Propiedades fotocatalíticas mejoradas de sistemas acoplados AgBr/SnO 2 bajo luz UV y visible Felipe Puga - Universidad de O´Higgins, San Fernando, Chile
10:30 - 11:00	Coffee Break
11:00 - 11:25	Uso del lodo residual de una depuradora como soporte de un catalizador (Dióxido de Titanio) en fotocatálisis para la remoción de contaminantes emergentes Kevin Tejada Meza Universidad - Católica de Santa María, Arequipa, Perú
11:25 - 11:50	Valorización termoquímica de residuos agroindustriales de plátano Lina Marcela Orozco Arboleda - Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia
11:50 - 12:50	Conferencia Magistral - Biopolímeros y sus aplicaciones en la industria farmacéutica Dr. Ricardo Riguera - Universidad de Santiago de Compostela, España Salón principal
12:50 - 14:00	Almuerzo - libre
14:00 - 14:25 14:25 - 14:50	Conferencia Magistral - Microwave Assisted Extraction of Natural Products Mirco Rossetti - Milestone SRL Italy Salón Principal
14:50 - 15:50	Mesa Redonda - Química de los venenos de secreción y su importancia terapéutica Dra. Hildaura Patiño - Universidad de Panamá, Panamá Dr. Gerardo Corzo - Universidad Nacional Autónoma de México, México Dr. Marcos Salazar - Universidad de Panamá, Panamá
15:50 - 16:15	Coffee Break
16:15 - 17:15	Conferencia Magistral - Catalizando una nueva química circular Dr. Javier García - Universidad de Alicante, España Salón principal
17:15 - 17:40 17:40 - 18:05	El papel emergente de la IA en la detección de Compuestos Bioactivos en Alimentos y Subproductos: Propiedades Promotoras de Salud Considerando Procesos Postcosecha Juliana García y Alfonso González - (ACS y CAS)

Martes 1 COLIBRÍ VIOLETA 5

8:00 – 8:15	Registro de Participantes
8:15 – 8:40	Exploración del espacio químico de actinobacterias provenientes de piscinas de petróleo de la Amazonía ecuatoriana Eliza Nuit Jara Negrete Pontificia - Universidad Católica del Ecuador, Ecuador
8:40 – 9:05	Estudios estructurales y biosintéticos de la melleína y la hidroximelleína, metabolitos secretados por el hongo fitopatógeno Macrophomina phaseolina Javier Barúa - Universidad Nacional de Asunción, Paraguay
9:05 – 10:05	Conferencia Magistral - Lenguajes científicos y lectura comprensiva en química: relaciones necesarias para la equidad social Dra. Sandra Rojas - Universidad de Santiago de Chile, Chile Salón principal
10:05 - 10:30	Análisis quimiométrico de mieles colombianas mediante conductividad eléctrica, color, actividad de agua, densidad óptica cenizas y poder rotatorio Guillermo Salamanca Grosso - Universidad de Tolima, Colombia
10:30 - 11:00	Coffee Break
11:00 - 11:25	Análisis de acrilamida en café robusta Coffea canephora mediante técnicas de separación Mayra Alejandra Paucar Calle - Universidad Central del Ecuador, Ecuador
11:25 - 11:50	Un quimiosensor fluorescente a base de quinolina para detectar iones cianuro Jorge Enrique Trilleras Vásquez - Universidad del Atlántico, Colombia
11:50 - 12:50	Conferencia Magistral - Biopolímeros y sus aplicaciones en la industria farmacéutica Dr. Ricardo Riguera - Universidad de Santiago de Compostela, España Salón principal
12:50 - 14:00	Almuerzo - libre
14:00 - 14:25 14:25 - 14:50	Conferencia Magistral - Microwave Assisted Extraction of Natural Products Mirco Rossetti - Milestone SRL Italy Salón Principal
14:50 - 15:50	Mesa Redonda - Química de los venenos de secreción y su importancia terapéutica Dra. Hildaura Patiño - Universidad de Panamá, Panamá Dr. Gerardo Corzo - Universidad Nacional Autónoma de México, México Dr. Marcos Salazar - Universidad de Panamá, Panamá
15:50 - 16:15	Coffee Break
16:15 - 17:15	Conferencia Magistral - Catalizando una nueva química circular Dr. Javier García - Universidad de Alicante, España Salón principal
17:15 - 17:40	Síntesis y caracterización de nuevos colorantes derivados del pireno para su uso en DSSCs Luis Alberto Illicachi Romer - Universidad Santiago de Cali, Colombia
17:40 - 18:05	Análisis del impacto del cóctel de bacteriófagos en el cultivo de la microalga *Desmodesmus communis* Ariadna Batista - Universidad Autónoma de Chiriquí, Panamá

Martes 1 COLIBRÍ BLANCO

8:00 – 8:15	Registro de Participantes
8:15 – 8:40	Estudio del potencial fertilizante de un compuesto orgánico mineral, y su aplicación piloto en cultivo de frijol Bibiana Milena Herrera Agudelo - Universidad Industrial de Santander, Colombia
8:40 – 9:05	Identificación de plaguicidas por cromatografía gaseosa y cromatografía líquida de alta resolución acopladas a espectrometría de masas en el fruto de piñas recolectadas en la ciudad de Santiago de Cali. Bieriz Camila Yanis Franky - Universidad Santiago de Cali, Colombia
9:05 – 10:05	Conferencia Magistral - Lenguajes científicos y lectura comprensiva en química: relaciones necesarias para la equidad social Dra. Sandra Rojas - Universidad de Santiago de Chile, Chile Salón principal
10:05 - 10:30	Desarrollo y Caracterización de Polímeros Superabsorbentes Biodegradables para una Mayor Retención de Agua y una Reducción en la Irrigación en la Agricultura José A. Ulloa - Universidad de Concepción
10:30 - 11:00	Coffee Break
11:00 - 11:25	Evaluación del Efecto Citotóxico de LL-37 en Modelos de Membrana Eucariota por Espectroscopia Infrarroja Juan Manuel Giraldo Lorza - Universidad de Antioquía, Colombia
11:25 - 11:50	Síntesis de nuevos dipeptoides con actividad contra la enzima M1 alanilaminopeptidasa Julieta Coro-Bermello - Sociedad Cubana de Química, Cuba
11:50 - 12:50	Conferencia Magistral - Biopolímeros y sus aplicaciones en la industria farmacéutica Dr. Ricardo Riguera - Universidad de Santiago de Compostela, España Salón principal
12:50 - 14:00	Almuerzo - libre
14:00 - 14:25 14:25 - 14:50	Conferencia Magistral - Microwave Assisted Extraction of Natural Products Mirco Rossetti - Milestone SRL Italy Salón Principal
14:50 - 15:50	Mesa Redonda - Química de los venenos de secreción y su importancia terapéutica Dra. Hildaura Patiño - Universidad de Panamá, Panamá Dr. Gerardo Corzo - Universidad Nacional Autónoma de México, México Dr. Marcos Salazar - Universidad de Panamá, Panamá Moderador: Licdo. Felipe Barría A.
15:50 - 16:15	Coffee Break
16:15 - 17:15	Conferencia Magistral - Catalizando una nueva química circular Dr. Javier García - Universidad de Alicante, España Salón principal
17:15 - 17:40	Síntesis Electroquímica de Óxidos de Níquel y Cobalto Soportados en Espumas de Níquel Julian David Ocampo Guzmán - Universidad de los Andes
17:40 - 18:05	Recubrimientos de nanoapatitas sobre superficies de titanio precalcificadas mediante ruta biomimética acelerada Loreley Morejón-Alonso - Universidad de La Habana

V Congreso Estudiantil de Química 2024

Miércoles 2 COLIBRÍ VIOLETA 1

8:00 – 8:15	Registro de Participantes
8:15 – 8:40	Películas de alginato cargadas con tween 80 para la desorción de petróleo impregnado en piedras Ana Valderrama - Universidad Nacional de Ingeniería, Perú
8:40 – 9:05	Correlación del espectro de MS/MS con mecanismos de fragmentación para la identificación de metabolitos secundarios: un enfoque basado en la estructura molecular Luis Cubilla-Ríos - Laboratorio de Bioorgánica Tropical, Universidad de Panamá
9:05 – 10:05	Conferencia Magistral - Caracterización precisa de microplásticos con espectroscopía láser en cascada cuántica Jorge Arturo Ortega Fraga - Agilent Technologies México Salón principal
10:05 - 10:30	Diseño y caracterización de un péptido quimérico con potencial actividad antiproliferativa, evaluado en líneas celulares de cáncer que expresan la integrina αvβ6 Silvia Natalia Jimenez Camacho - Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Colombia
10:30 - 11:00	Coffee Break
11:00 - 11:25	Desde el Saber Ancestral a la Constatación de la Bioactividad, una Investigación en dos Plantas Medicinales Nativas del Ecuador Paco F. Noriega Rivera - Universidad Politécnica Salesiana, Ecuador
11:25 - 11:50	Estudio Químico biodirigido de la planta de manglar Mora oleifera Sergio Martínez Luis - Centro de Biodiversidad y Descubrimiento de Drogas INDICASAT AIP
11:50 - 12:50	Conferencia Magistral - Aprendizaje a distancia: un enfoque experimental Dr. Jorge Ibáñez - Universidad Iberoamericana de México, México Salón principal
12:50 - 14:00	Almuerzo - libre
14:00 - 14:25	Las Olimpiadas de Química en Panamá Dr. Carlos Ríos - Universidad de Panamá
14:25 - 14:50	Proceso y Beneficios del Reconocimiento ACS para Programas Globales de Química a Nivel de Pregrado Lawal Wasiu - American Chemical Society
14:50 - 15:50	Mesa Redonda: Materiales y sus aplicaciones industriales Dr. Ricardo Riguera - Universidad Santiago de Compostela Dr. Javier García - Universidad de Alicante Dra. Luisa Whittaker-Brooks - Universidad de Utah Moderador: Dr. Julio F. Mata Segreda - Universidad de Costa Rica
15:50 - 16:15	Coffee Break
16:15 - 17:15	Conferencia Magistral - El cabello y su aplicación en forensic Dr. Jean Claude Álvarez - Hospital Universitario de Paris Saclay - Francia Salón principal
17:15 - 17:40	ACS, Premio de la mujer latinoamericana en química Salón principal
17:40 - 18:05	

Miércoles 2 COLIBRÍ VIOLETA 5

36° CLAQ PANAMÁ 2024
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

8:00 – 8:15	Registro de Participantes
8:15 – 8:40	**ACS on Campus**
8:40 – 9:05	
9:05 – 10:05	**Conferencia Magistral - Caracterización precisa de microplásticos con espectroscopía láser en cascada cuántica** Jorge Arturo Ortega Fraga - **Agilent Technologies México** Salón principal
10:05 - 10:30	**Síntesis de nuevos híbridos moleculares 4-(4-hidroxi-3-metoxifenil) tetrahidroquinolina/1,2,3-triazol, compuestos con potencial actividad anticancerígena** Arnold Rafael Romero Bohórquez - **Universidad Industrial de Santander**
10:30 - 11:00	Coffee Break
11:00 - 11:25	**ACS on Campus**
11:25 - 11:50	
11:50 - 12:50	**Conferencia Magistral - Aprendizaje a distancia: un enfoque experimental** Dr. Jorge Ibáñez - **Universidad Autónoma de México, México - Senacyt** Salón principal
12:50 - 14:00	Almuerzo - libre
14:00 - 14:25	**ACS on Campus**
14:25 - 14:50	
14:50 - 15:50	Mesa Redonda: Materiales y sus aplicaciones industriales Dr. Ricardo Riguera - **Universidad Santiago de Compostela** Dr. Javier García - **Universidad de Alicante** Dra. Luisa Whittaker-Brooks - **Universidad de Utah** Moderador: Dr. Julio F. Mata Segreda - **Universidad de Costa Rica**
15:50 - 16:15	Coffee Break
16:15 - 17:15	**Conferencia Magistral - El cabello y su aplicación en forensic** Dr. Jean Claude Álvarez - **Hospital Universitario de Paris Saclay - Francia** Salón principal
17:15 - 17:40	**ACS, Premio de la mujer latinoamericana en química** Salón principal
17:40 - 18:05	

V Congreso Estudiantil de Química 2024

Miércoles 2 COLIBRÍ BLANCO

8:00 – 8:15	Registro de Participantes
8:15 – 8:40	Desarrollo de una nanoemulsión agua en aceite con potencial antioxidante y fotoprotector a base de aminoácidos tipo micosporinas Manuela Gallego Villada - Universidad de Antioquia
8:40 – 9:05	Sistemas catalíticos Heterogéneos y homogéneos para la conversión de Glucosa a 5-Hidroximetilfurfural Kevin Suárez - Universidad el Bosque
9:05 – 10:05	Conferencia Magistral - Caracterización precisa de microplásticos con espectroscopia láser en cascada cuántica Jorge Arturo Ortega Fraga - Agilent Technologies México Salón principal
10:05 - 10:30	Explorando el método Singapur en la enseñanza de la bioquímica: Un análisis integral Alison Borda Buitrago - Universidad Pedagógica Nacional, Colombia
10:30 - 11:00	Coffee Break
11:00 - 11:25	Talleres de Bioquímica Cecilia I. Díaz - Universidad de Panamá
11:25 - 11:50	La Química en la cocina: Una estrategia innovadora para el aprendizaje de la química Victor Badillo - Caribbean University
11:50 - 12:50	Conferencia Magistral - Aprendizaje a distancia: un enfoque experimental Dr. Jorge Ibáñez - Universidad Iberoamericana de México, México Salón principal
12:50 - 14:00	Almuerzo - libre
14:00 - 14:25	Desenmarañando la fotoquímica del azul de toluidina para el desarrollo de aplicaciones en terapia fotodinámica José Luis Robinson - Universidad de Panamá
14:25 - 14:50	Respuesta molecular del clavel (Dianthus Caryophyllus L.) asociada a la inducción de resistencia sistemática adquirida tras la aplicación foliar de tiamina durante el marchitamiento vascular causado por Fusarium oxysporum f. sp. dianthi. Harold Duban Ardila - Universidad Nacional de Colombia
14:50 - 15:50	Mesa Redonda: Materiales y sus aplicaciones industriales Dr. Ricardo Riguera - Universidad Santiago de Compostela Dr. Javier García - Universidad de Alicante Dra. Luisa Whittaker-Brooks - Universidad de Utah Moderador: Dr. Julio F. Mata Segreda - Universidad de Costa Rica
15:50 - 16:15	Coffee Break
16:15 - 17:15	Conferencia Magistral - El cabello y su aplicación en forensic Dr. Jean Claude Álvarez - Hospital Universitario de Paris Saclay, Francia Salón principal
17:15 - 17:40	ACS, Premio de la mujer latinoamericana en química Salón principal
17:40 - 18:05	

Jueves 3 COLIBRÍ VIOLETA 1

8:00 – 8:15	Registro De Participantes
8:15 – 8:40	Estudio de la reacción de ciclocondensación oxidativa de 2-formilquinolin-3-carboxilatos con 2'-aminobenzamidas para la síntesis de nuevos híbridos moleculares de tipo estirilquinolina-quinazolinona Diana M. Ardila - Universidad Industrial de Santander
8:40 – 9:05	Síntesis de Oximas Derivadas de Alquilacilpirazolonas Julio Bernardo Belmar Mellado - Universidad de Concepción
9:05 – 10:05	Conferencia Magistral - Terapia Fotoquímica: De la ciencia básica a la Aplicada como alternativa para el tratamiento del cáncer Dr. José Luis Robinson - Universidad de Panamá Salón principal
10:05 - 10:30	Quenching del oxígeno singulete por antioxidantes naturales y sintéticos: estudio cinético Carlos Díaz Uribe - Universidad del Atántico, Colombia
10:30 - 11:00	Coffee Break
11:00 - 11:25 11:25 - 11:50	Conferencia Magistral - ¿Por qué es importante el análisis de sustancias per y poli-fluoroalquiladas (PFAS) y cuáles son los desafíos de su análisis en muestras ambientales? Citlalli Domínguez - Agilent Technologies Mexico Salón Principal
11:50 - 12:50	Conferencia Magistral - Cinética de evaporación de mezclas líquidas y su manejo seguro Dr. Julio Mata Segreda - Universidad de Costa Rica, Costa Rica Salón principal
12:50 - 14:00	Almuerzo - libre
14:00 - 14:25	Estudio de adsorción monocomponente de cadmio y cobre en biocarbón de Theobroma cacao L. obtenido por pirólisis asistida por microondas Jhonny Gabriel Correa Abril - Universidad Central del Ecuador, Ecuador
14:25 - 14:50	Belleza y tecnología bajo la lupa: un análisis multifactorial de contaminantes en ambientes laborales cerrados Manuela chong/Yomairy Aikman - Universidad de Panamá
14:50 - 15:50	Mesa Redonda - Instituciones que rigen la profesión de químico en Latam-FLAQ Brenda Checa - Colegio Panameño de Químicos, María Santiago Reyes - Colegio de Químicos de Puerto Rico, José de Ribamar Oliveira Filho - Conselho Federal de Química, Brasil Moderador - Dr. Rafael Vásquez
15:50 - 16:15	Coffee Break
16:15 - 17:15	Conferencia Magistral - Compuestos con Potencial Biomédico y Agrícola a Partir de Microorganismos Simbióticos de Panamá Dr. Marcelino Gutierrez - INDICASAT Salón principal
17:15 - 17:40	Evaluación de un extracto vegetal del género Zanthoxylum con actividad agonista LXR como potencial agente protector de la mielina en el modelo de desmielinización por cuprizona Daniel Esteban Jiménez Correa - Universidad Nacional de Colombia
17:40 - 18:05	Péptidos Antitumorales Helicales con Efecto Citotóxico Selectivo en Células Tumorales Afectan la Transcripción de Genes que Median la Apoptosis y Supervivencia Daniela Alejandra Sinisterra Tovar - Universidad Nacional de Colombia

Jueves 3 COLIBRÍ VIOLETA 5

36° CLAQ PANAMÁ 2024
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

8:00 – 8:15	Registro De Participantes
8:15 – 8:40	Análisis cinético de peroxidasa y polifenoloxidasa en frutos Rubus glaucus y su influencia en el aprendizaje multidimensional de cinética enzimática Jairo Granados - Universidad de Cundinamarca
8:40 – 9:05	Clases paseos: posibilidades de discusión socio científica en la enseñanza de la química Jorge C. Messeder - Universidade Federal Fluminense
9:05 – 10:05	Conferencia Magistral - Terapia Fotoquímica: De la ciencia básica a la Aplicada como alternativa para el tratamiento del cáncer Dr. José Luis Robinson - Universidad de Panamá Salón principal
10:05 - 10:30	Optimización de proceso foto-electro Fenton solar para la degradación de contaminantes de preocupación emergente y desinfección de efluentes de plantas de tratamiento de aguas residuales Ricardo Salazar González - Pontificia Universidad Católica de Chile
10:30 - 11:00	Coffee Break
11:00 - 11:25 11:25 - 11:50	Conferencia Magistral - ¿Por qué es importante el análisis de sustancias per y poli-fluoroalquiladas (PFAS) y cuáles son los desafíos de su análisis en muestras ambientales? Citlalli Domínguez - Agilent Technologies Mexico Salón Principal
11:50 - 12:50	Conferencia Magistral - Cinética de evaporación de mezclas líquidas y su manejo seguro Dr. Julio Mata Segreda - Universidad de Costa Rica, Costa Rica Salón principal
12:50 - 14:00	Almuerzo - libre
14:00 - 14:25	Identificación de Compuestos Orgánicos Volátiles de Mora oleifera Dr. Sergio Martínez Luis - INDICASAT
14:25 - 14:50	Abordajes computacionales para predecir las preferencias de aminoácidos en interacciones proteína-proteína Dr. Alejandro Llanes - INDICASAT
14:50 - 15:50	El estrés oxidativo en la inmunología MSc. Alcíbiades Guerra - Caja del Seguro Social, Panamá
15:50 - 16:15	Coffee Break
16:15 - 17:15	Conferencia Magistral - Compuestos con Potencial Biomédico y Agrícola a Partir de Microorganismos Simbióticos de Panamá Dr. Marcelino Gutierrez - INDICASAT Salón principal
17:15 - 17:40	Desafíos y oportunidades analíticas en el estudio de los disruptores endocrinos en la evaluación del exposoma Felipe Barría - Universidad de Panamá
17:40 - 18:05	Uso de la fluorescencia tridimensional y los EEMS para la caracterización de la composición espectroscópica del agua Mario L. Miranda - Universidad de Panamá

V Congreso Estudiantil de Química 2024

Jueves 3 COLIBRÍ BLANCO

36° CLAQ PANAMÁ 2024
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

8:00 – 8:15	Registro De Participantes
8:15 – 8:40	Adsorción de sulfato en sistemas Mg-Al/Carbón activado Edgardo Meza Fuentes - Universidad de Cartagena
8:40 – 9:05	Efecto de la concentración de un espumante y reticulante férrico en la estructura de un criogel de pectina diseñado como matriz alimentaria Helbert Portugal - Universidad Nacional de San Agustín de Arequipa
9:05 – 10:05	Conferencia Magistral - Terapia Fotoquímica: De la ciencia básica a la Aplicada como alternativa para el tratamiento del cáncer Dr. José Luis Robinson - Universidad de Panamá Salón principal
10:05 - 10:30	Síntesis de ésteres biliares de cadena corta. Explorando su potencial como agentes gelificantes Jair García Méndez - Laboratorio de Biomoléculas y Biomateriales, Cinvestav-Mérida
10:30 - 11:00	Coffee Break
11:00 - 11:25 11:25 - 11:50	Conferencia Magistral - ¿Por qué es importante el análisis de sustancias per y poli-fluoroalquiladas (PFAS) y cuáles son los desafíos de su análisis en muestras ambientales? Citlalli Domínguez - Agilent Technologies Mexico Salón Principal
11:50 - 12:50	Conferencia Magistral - Cinética de evaporación de mezclas líquidas y su manejo seguro Dr. Julio Mata Segreda - Universidad de Costa Rica Salón principal
12:50 - 14:00	Almuerzo - libre
14:00 - 14:25	Transducción Audible del Espectro Infrarrojo: Explorando la Síntesis Sónica de Vibraciones Moleculares Romel S. Guañuna Sanguña - Universidad de Investigación de Tecnología Experimental Yachay Tech
14:25 - 14:50	Estudio computacional de la viscosidad de una disolución acuosa de fructosa utilizando el modelo SPC/E mediante dinámica molecular con GROMACS Elvis Barahona - Universidad de Panamá
14:50 - 15:50	La química y la biología molecular de neurotoxinas peptídicas de venenos y sus aplicaciones terapéuticas Dr. Gerardo Corzo - Universidad Nacional Autónoma de México
15:50 - 16:15	Coffee Break
16:15 - 17:15	Compuestos con Potencial Biomédico y Agrícola a Partir de Microorganismos Simbióticos de Panamá Dr. Marcelino Gutierrez - INDICASAT Salón principal
17:15 - 17:40	Síntesis de nanocatalizadores soportados en óxido de grafeno reducido y su aplicación en la producción de diésel renovable María Mercado - Universidad Industrial de Santander
17:40 - 18:05	Evidencia de los efectos del medioambiente sobre la durabilidad del concreto en Panamá Cecilio Hernández - Universidad Tecnológica de Panamá

V Congreso Estudiantil de Química 2024

Viernes 4 COLIBRÍ VIOLETA 1

8:00 – 8:15	Registro De Participantes
8:15 – 8:40	La enseñanza de la química orgánica a nivel postsecundario universitario desde la innovación curricular: una reflexión fenomenológica desde la óptica de los profesores universitarios Rebecca Soler Rodríguez - Caribbean University
8:40 – 9:05	Implementación del modelo TPACK para la enseñanza de la química a nivel de educación media y su influencia en el rendimiento académico Erik Gavidia - Universidad de Panamá
9:05 – 10:05	Conferencia Magistral - Inteligencia Artificial Dra. Aura López - Centro de Investigación Educativa Salón principal
10:05 - 10:30	Caracterización de metales en relaves provenientes de minería artesanal de oro por espectroscopia de absorción atómica en el municipio de Suárez Cauca Colombia José Antonio Gallo - Universidad del Cauca
10:30 - 11:00	Coffee Break
11:00 - 11:25 11:25 - 11:50	Conferencia Magistral - Herramientas Analíticas para la Investigación en Química Aplicada Dr. Diego Grassi - Analytical Technologies, Panamá Salón principal
11:50 - 12:50	Conferencia Magistral - Matemática en la enseñanza de la Química Dra. Jeanette Shakalli - Fundapromat - Panamá Salón principal
12:50 - 14:00	Almuerzo - libre
14:00 - 14:25	Integración de exfoliación y propiedades de inmunoafinidad en nanotubos de carbono de paredes múltiples mediante funcionalización no covalente con inmunoglobulina G humana Soledad Bollo Dragnic - Universidad de Chile
14:25 - 14:50	Captura reversible de fósforo empleando arcillas funcionalizadas Erick Estrada Palencia - Universidad de San Carlos de Guatemala
14:50 - 15:50	Mesa Redonda: Explorando Nuevos Horizontes: Ciencia, Curiosidad y el Futuro en tus Manos Dr. Ricardo Riguera - Universidad Santiago de Compostela, España Dra. Sandra Rojas - Universidad de Santiago de Chile, Chile
15:50 - 16:15	Coffee Break
16:15 - 17:15	Conferencia Magistral - La fuerza del enlace Químico (Química Computacional y Teórica) Dr. Jesús Hernández Trujillo - Universidad Nacional Autónoma de México Salón principal
17:15 - 17:40 17:40 - 18:05	Clausura Salón principal

Viernes 4 COLIBRÍ VIOLETA 5

8:00 – 8:15	Registro De Participantes
8:15 – 8:40	Venenos de escorpión en Panamá: conocimientos actuales y perspectivas científicas Marcos salazar - Universidad de Panamá
8:40 – 9:05	Análisis de superficies de respuesta de la depolimerización de PET con catalizadores de Ni-Zn-Al Edgardo Meza Fuentes - Universidad de Cartagena
9:05 – 10:05	Conferencia Magistral - Inteligencia Artificial Dra. Aura López - Centro de Investigación Educativa, Panamá Salón principal
10:05 - 10:30	Conviviendo con moléculas Karen Daniela Pino Morales - Universidad Santiago de Cali, Colombia
10:30 - 11:00	Coffee Break
11:00 - 11:25 11:25 - 11:50	Conferencia Magistral - Herramientas Analíticas para la Investigación en Química Aplicada Dr. Diego Grassi - Analytical Technologies, Panamá Salón principal
11:50 - 12:50	Conferencia Magistral - Matemática en la enseñanza de la Química Dra. Jeanette Shakalli - Fundapromat - Panamá Salón principal
12:50 - 14:00	Almuerzo - libre
14:00 - 14:25	Evaluación de la actividad anti-inflamatoria y antibacterial de la enzima serratiopeptidasa aislada de la bacteria Serratia marcescens C8 Augusto Zuluaga Velez - Universidad Tecnológica de Pereira
14:25 - 14:50	Diseño de péptidos derivados de la proteína ACE2 capaces de neutralizar pseudovirus de SARS-Cov-2 mediante aglutinación Sara Catalina Nieto Rincón - Universidad Nacional de Colombia
14:50 - 15:50	Mesa Redonda: Explorando Nuevos Horizontes: Ciencia, Curiosidad y el Futuro en tus Manos Dr. Ricardo Riguera - Universidad Santiago de Compostela, España Dra. Sandra Rojas - Universidad de Santiago de Chile, Chile
15:50 - 16:15	Coffee Break
16:15 - 17:15	Conferencia Magistral - La fuerza del enlace Químico (Química Computacional y Teórica) Dr. Jesús Hernández Trujillo - Universidad Nacional Autónoma de México, México Salón principal
17:15 - 17:40 17:40 - 18:05	Clausura Salón principal

Viernes 4 COLIBRÍ BLANCO

8:00 – 8:15	Registro De Participantes
8:15 – 8:40	Evaluación del efecto del tiempo y el control de temperatura sobre la composición y la actividad antioxidante de Ganoderma lucidum obtenido por fermentación en estado líquido Ana María Suarez Rojas - Universidad Nacional de Colombia
8:40 – 9:05	Análisis del efecto del campo magnético sobre el flujo de agua a través de acuaporinas TIP3;1 mediante dinámica molecular en GROMACS Diego Fernando Nieto Giraldo - Universidad de Caldas, Colombia
9:05 – 10:05	Conferencia Magistral - Inteligencia Artificial Dra. Aura López - Centro de Investigación Educativa Salón principal
10:05 - 10:30	Diseño de un péptido catiónico anfipático que presenta actividad antibacterial especifica contra *E. coli O157:H7* y *Klebsiella pneumoniae* Yulima Andrea Barboza Nieves - Universidad Nacional de Colombia
10:30 - 11:00	Coffee Break
11:00 - 11:25 11:25 - 11:50	Conferencia Magistral - Herramientas Analíticas para la Investigación en Química Aplicada Dr. Diego Grassi - Analytical Technologies, Panamá Salón principal
11:50 - 12:50	Conferencia Magistral - Matemática en la enseñanza de la Química Dra. Jeanette Shakalli - Fundapromat - Panamá Salón principal
12:50 - 14:00	Almuerzo - libre
14:00 - 14:25	Porfirinatos de metales de transición como bits cuánticos transition metal porphyrinates as quantum qubits Kimberly Quintero - Universidad de Panamá
14:25 - 14:50	Eficiencia del lodo de una planta potabilizadora de agua como adsorbente de un colorante textil en la ciudad de Arequipa, Perú Annie V. Challco H. - Universidad Católica de Santa María
14:50 - 15:50	Mesa Redonda: Explorando Nuevos Horizontes: Ciencia, Curiosidad y el Futuro en tus Manos Dr. Ricardo Riguera - Universidad Santiago de Compostela, España Dra. Sandra Rojas - Universidad de Santiago de Chile, Chile
15:50 - 16:15	Coffee Break
16:15 - 17:15	Conferencia Magistral - La fuerza del enlace Químico (Química Computacional y Teórica) Dr. Jesús Hernández Trujillo - Universidad Nacional Autónoma de México Salón principal
17:15 - 17:40 17:40 - 18:05	Clausura Salón principal

36º CLAQ
PANAMÁ
2024
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Programa Exposiciones de Póster

Congreso Latinoamericano de Química 2024

Programa Oficial

Póster

V Congreso Estudiantil de Química 2024

COLEGIO PANAMEÑO DE QUÍMICOS 1974

50 AÑOS 1974 - 2024

36° CLAQ 2024 PANAMÁ

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ

Construyendo Puentes Químicos en América Latina

Martes 1

LOBBY CENTRO DE CONVENCIONES SORTIS HOTEL

Alimentos (ALM)		
8:30 - 10:30	Actividad antihipertensiva in vitro y antioxidante del lulo Amazónico Cocona (Solanum sessiliflorum D.) Liceth Natalia Cuéllar Alvarez - Universidad de la Amazonia, Colombia	Determinación de acrilamida en bebidas de café arábigo (C. arábica), variedad Catuaí tostado artesanalmente Tamara Fukalova - Universidad Central del Ecuador
	Valorizacion de residuos de espino maulino (acacia caven) y avellana chilena (gevuina avellana) mediante la obtención de compuestos fenólicos con poder antioxidante y antimicrobiano mediante sistema de ultrasonido Marcos Flores - Universidad de Talca - Chile	Mejora del comportamiento termico de aceite de pepa de zapallo no refinado adicionado de ingredientes culinarios Claudia Elizabeth Vergara Valdes - Universidad Santo Tomás, Talca, Chile
10:30 - 11:00	Coffee Break	
11:00 - 12:50	Bio-refinación de compuestos bioactivos de alto valor funcional a partir de avellana chilena (gevuina avellana) utilizando co 2 supercrítico y extracción acelerada con solventes Jaime Alejandro Ortiz Viedma - Universidad de Chile	Estudio de los compuestos activos en el aroma de la pitanga (Eugenia uniflora L.) Sergio Daniel Rodríguez Parra - Universidad Nacional de Colombia
	Aplicación de la espectroscopia infrarroja en la adulteración de cúrcuma longa Gloria Cosco Salguero - Universidad Nacional Mayor de San Marcos	Uso de NaDES para la extracción de betalaínas en semillas de espinaca como solventes listos para usar en la formulación de caramelos duros Valeria Cedeño Fierro - Universidad Nacional de Colombia
12:50 - 14:00	Almuerzo	
14:00 - 15:50	Estudio de la cinética de liberación de capsaicina a partir de una emulsión O/W encapsulada en perlas de pectina Neptali Ale Borja - Universidad Nacional Mayor de San Marcos	Obtención deantioxidantes naturales de extractos de la vaina y semilla del espino maulino (acaia caven) mediante sc-co2 y ase capaces de inhibir la oxidacion de diferentes matrices lipidicas y su comparacion con metodos tradicionales Jaime Alejandro Ortiz Viedma - Universidad de Chile
	Efecto de la adición de extractos carotenoides obtenidos de las cáscaras de cocona (Solanum sessiliflorum) y tumbo serrano(Passiflora tripartita var. mollisima) sobre las propiedades y la estabilidad de color en helados de crema María del Rosario Calixto Cotos - Universidad Nacional Mayor de San Marcos	Adaptación del método de análisis de carotenoides en queso americano utilizando extracción en medio neutro y UHPLC-DAD Maricela Correa - Universidad de Panamá
15:50 - 16:15	Coffee Break	

Martes 1

LOBBY CENTRO DE CONVENCIONES SORTIS HOTEL

	Materiales (MAT)	
8:30 - 10:30	Estudio de las propiedades catalíticas de nanopartículas de óxido de cerio dopado con gadolinio en la reacción de transesterificación del aceite de girasol para la obtención de biodiésel. Samantha Valladares - Universidad Central del Ecuador	Evaluación comparativa de la remoción de fosfatos en matrices simuladas y reales con cascarilla de arroz transformada química y térmicamente Luis Fernando Rodriguez Herrera - Universidad del Tolima, Colombia
	Interacciones iónicas en gelificante de bajo peso molecular basado en L-Valina y ácido succínico Anderson Guarnizo Franco - Universidad del Tolima, Colombia	Formación de enlaces covalentes dinámicos de ácidos borónicos en la interfaz polímero-nanopartículas para la obtención de hidrogeles nanocompuestos inyectables José A. Ulloa - Universidad de Concepción, Chile
	Turning waste into resources. Efficient synthesis of biopolyurethanes from used cooking oils and CO2 Francisca Werlinger	Nanopartículas de magnetita modificadas con un gelificante de bajo peso molecular basado en L-Valina y ácido succínico para su uso en hipertermia Anderson Guarnizo Franco - Universidad del Tolima, Colombia
10:30 - 11:00	Coffee Break	
11:00 - 12:50	Nanopartículas de Oro Funcionalizadas con Gelificante Basado en L-Valina y Ácido Succínico: Aplicaciones Potenciales en Hipertermia Anderson Guarnizo Franco - Universidad del Tolima, Colombia	Síntesis de nanohíbridos basados en nanosílice y celulosa obtenida a partir de linteres de algodón: Estabilidad termo-reológica y cinética de gelificación para tratamientos de conformance químico Pablo Moreno - Universidad Industrial de Santander
	Caracterización de envases poliméricos Mediante Espectroscopía RAMAN y FTIR Abdiel Almanza - Universidad de Panamá	Síntesis de materiales compuestos con potencial aplicación como fotocatalizadores para la producción de hidrogeno en una celda fotoelectroquímica Lizeth Calderon - Universidad Industrial de Santander
12:50 - 14:00	Almuerzo	
14:00 - 15:50	Utilización de electrodo de carbón vítreo dopado con poli anilina en la determinación de urea en soluciones acuosas por técnicas electroquímicas Alexis F. Fernandez A. - Universidad Yachay Tech, Ecuador	Diseño de Nanocápsulas Poliméricas Como Vehículos Para La Liberación Controlada de Hierro Valentina Camacho Anaconda - Universidad Nacional de Colombia
	Desarrollo de un bioinsecticida a partir de aceites esenciales encapsulados en nanopartículas poliméricas con estructura "core-shell" Manuel Alfonzo Rodríguez Fernández - Universidad Nacional de Colombia	Desempeño de la ZIF-71(ClBr) en la separación de una mezcla ABE Norma Tiempos Flores - Universidad Autónoma de Nuevo León, México
	Caracterización de micelas poliméricas derivadas del autoensamble de copolímeros de monometoxi-poli(etilenglicol)-poli(ε-caprolactona) Johan Bermudez Vargas - Universidad Nacional de Colombia	Implementación de polimerizaciones controladas para la fabricación de estándares de peso molecular basados en polimetilmetacrilato, poliestireno y policaprolactona Johan Bermudez Vargas - Universidad Nacional de Colombia
15:50 - 16:15	Coffee Break	
16:15 - 18:00	Desarrollo de formulaciones nutracéuticas basadas en curcumina encapsulada en micelas poliméricas Doris Paola Rojas Pedreros - Universidad de Colombia	Desempeño de superficies a base de polímeros y de solventes polares con soluciones de petróleo/hexano Johana Rodríguez - Centro Para la Industria Petroquímica-SENA, Cartagena, Colombia
	Estudio morfológico de nano-apatitas depositadas sobre andamios de ácido poliláctico impresos por FDM Loreley Morejón-Alonso - Universidad de La Habana	Síntesis No Convencional de Óxido de Zinc a Escala Nanométrica Empleando Extracto Etanolico de Hojas de Calea sessiliflora Less Juan Camilo Lopez Cajas - Universidad del Cauca, Colombia
	Degradación fotocatalítica en fase sólida de residuos de poliestireno expandido (EPS) bajo radiación UV César A. Jaramillo P. - - Universidad del Tolima, Colombia	

Martes 1

LOBBY CENTRO DE CONVENCIONES SORTIS HOTEL

Bioquímica (BIO)		
8:30 - 10:30	Estudio de la interacción de Fengicinas producidas por Bacillus velezensis MEP218 con Modelos de Membrana Representativos de Pseudomonas aeruginosa Marcela Manrique Moreno - Universidad de Antioquia	Evaluación del efecto de los péptidos Crotalicidina y NA-CATH-ATRA1-ATRA1 en modelos de células de cáncer mediante espectroscopia infrarroja Juan Manuel Giraldo Lorza - Universidad de Antioquia
	La fracción enriquecida ZC1 de un extracto de Zanthoxylum sp produce cambios cognitivos y moleculares en animales 3xTg-AD Paula Andrea Vargas Pinilla - Universidad Nacional de Colombia	Extractos de plantas con potencial actividad agonista LXR como una estrategia terapéutica contra la enfermedad de Alzheimer Jonathan Muñoz Cabrera - Universidad Nacional de Colombia
10:30 - 11:00	Coffee Break	
11:00 - 12:50	Búsqueda de agonistas del receptor X hepático en un extracto del género Zanthoxylum Daniel Felipe López Nino - Universidad Nacional de Colombia	Análisis metabolómico basado en espectrometría de masas de alta resolución revela diferencias metabólicas entre células planctónicas y sésiles de Salmonella Enteritidis ATCC 13076 William Fernando Hidalgo B. - Universidad Industrial de Santander
	El Azul de Toluidina y sus derivados en asociación con la Albúmina de Suero Humano hacia aplicaciones fotoquímicas Melannie García-Sánchez - Universidad de Panamá	Identificación, aislamiento y caracterización de toxinas que afectan el canal de potasio (KTx) del escorpión Centruroides bicolor. Anthony Rodriguez - Universidad de Panamá
12:50 - 14:00	Almuerzo	
14:00 - 15:50	Uso de un péptido de unión a la integrina αvβ6 para la detección de células cancerosas que la expresan Daniela Perdomo Joven - Universidad Nacional de Colombia	Péptidos Quiméricos Anti-αvβ6 y NF-κB Inducen Muerte Celular Regulada en Líneas Celulares Tumorales de Manera Selectiva Según el Nivel de Expresión de la Integrina αvβ6 Erika Vanesa Díaz Sana - Universidad Nacional de Colombia
	Evaluación del comportamiento de Gymnodinium catenatum y Alexandrium sp. en los medios de cultivo GSe y f/2 y su perfil lípidco. Edgardo Moscoso - Universidad Autónoma de Chiriquí	Extracción y análisis de pigmentos de hongos filamentosos deteriorantes de las encuadernaciones en pergamino de unidades bibliográficas del Fondo Antiguo de la Biblioteca Nacional de Colombia (BNC) Sebastián Sarmiento Pineda - Universidad Nacional de Colombia
15:50 - 16:15	Coffee Break	
16:15 - 18:00	Diseño de primers para genes relacionados con la síntesis de compuestos de interés en Cannabis Sativa Var. Mango Biche Harold Duban Ardila - Universidad Nacional de Colombia	Hepcidina como marcador inflamatorio, y su relación con el fierro, transferrina y ferritina en pacientes post COVID-19 de Villa El Salvador, Lima-Perú. Juan Manuel Parreño Tipian - Universidad Nacional Mayor de San Marcos
	Estudio de los Procesos Fotosensibilizados de un Derivado de Azul de Toluidina sobre Macromoléculas de Importancia en la Terapia Fotodinámica Whitney S. Querini-Sanguillen - Universidad de Panamá	

Martes 1

LOBBY CENTRO DE CONVENCIONES SORTIS HOTEL

Enseñanza de la Química (ENQ)		
11:00 - 12:50	Química Plegada: Una nueva configuración para aprender química Alfonso Ramírez - Universidad del Cauca, Colombia	Proposición de la disciplina de Química con relación al plan de estudios de la Educación Básica en países sudamericanos vinculados a la UNESCO Emerson Pires - Universidad Tecnológica Federal do Paraná, Brasil
	Evaluación del poder antioxidante de extractos bioactivos obtenidos de la hoja de Coffea arabica L. Desafío para el desarrollo de habilidades investigativas. Laura Ximena Murcia - Universidad Pedagógica Nacional, Colombia	Influencia de la metodología ABP sobre la argumentación de los juicios metacognitivos en ciencias de docentes en formación del programa de Licenciatura en Ciencias Naturales de la Universidad de Caldas María José Salgado Patiño - Universidad de Caldas, Colombia

Química Analítica (QMA)		
11:00 - 12:50	Estudio del Comportamiento Electroquímico de un Ligando Derivado de Terpiridina al Interaccionar con Iones Cobre, Zinc y Mercurio en Medio Acuoso Ingri Johanna Reina - Universidad del Cauca, Colombia	Fabricación y modificación de electrodos serigrafiados con PEDOT-Cu sintetizado químicamente para la detección de glifosato María Paula Rodríguez Cardenas - Universidad Nacional de Colombia

Procesos (PTI)		
8:30 - 10:30	Epoxidación de ciclohexeno mediante el uso de Machine Learning Cristian David Miranda - Universidad del Cauca, Colombia	Síntesis enzimática de biodiesel a través de nuevos biocatalizadores de lipasas inmovilizadas en carbón activado obtenido de cáscaras de plátano Luis Barbosa - Universidad del Tolima, Colombia
	Valorización de subproductos de mandarina (Citrus reticulata): composición proximal, identificación de compuestos volátiles y caracterización estructural de polisacáridos en hoja y epicarpio Camilo Rodríguez - Universidad Nacional de Colombia	Aceite de Aguacate (Persea americana Mill.) var. Lorena y Monoglicéridos: Una Sinergia para la Producción de Oleogeles Michael Moreno - Universidad Nacional de Colombia
10:30 - 11:00	Coffee Break	
11:00 - 12:50	Exploración de alternativas menos tóxicas para la formulación de pinturas: Una revisión sistemática para reducir la contaminación e intoxicación por plomo Kathleen Abrego - Universidad de Panamá	Abordando la crisis energética: una revisión sistemática sobre biocombustibles líquidos como estrategia rentable para la diversificación energética Yisseth Perez - Universidad de Panamá

Martes 1

LOBBY CENTRO DE CONVENCIONES SORTIS HOTEL

Ambiental y Agrícola (AMA)		
11:00 - 12:50	Formas de eliminación de medicamentos no consumidos y/o vencidos en hogares del distrito de Chorrillos, Lima-Perú Juan Manuel Parreño Tipian - Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Perú	Síntesis de biocatalizadores heterogéneos de peroxidasa de Panicum Maximum inmovilizada en carbón activado para la degradación de índigo carmín Diana Paola Vargas Delgadillo - Universidad del Tolima, Colombia
	Evaluación de los niveles de NO2 y SO2 en diversas zonas con alto tráfico en Panamá Alma Espinosa - Universidad Tecnológica de Panamá	Evaluación de los niveles de Ozono y CO 2 en diversas zonas con alto tráfico en Panamá Cecilio Hernández - Universidad Tecnológica de Panamá
12:50 - 14:00	Almuerzo	
14:00 - 15:50	Evaluación de los niveles de PM10 y PM2.5 en diversas zonas con alto tráfico en Panamá Jorge Olmos - Universidad Tecnológica de Panamá	

Jueves 3

LOBBY CENTRO DE CONVENCIONES SORTIS HOTEL

	Ambiental y Agricola (AMA)	
8:30 - 10:30	Extracción de pectina a partir de la cáscara de cacao (Theobroma cacao L.) para su aplicación en la remoción de Cr (VI) en medio acuoso Jordan Alexis Aparicio - Universidad Nacional de Ingeniería, Perú	Carbonizados derivados del bagazo de fique para la remoción de metilparabeno Yaned Milena Correa Navarro - Universidad de Caldas, Colombia
	Cómo ha surgido el estudio de las emulsiones, y su paso a las Pickering de nanocelulosa: un análisis bibliométrico Cesar Augusto Bernal Samaniego - Universidad de Costa Rica	Evaluación de Contaminantes de Preocupación Emergente y genes de resistencia a antibióticos en el Río Mapocho (Chile): Un estudio exhaustivo sobre la calidad del agua y el impacto de las aguas residuales municipales Ricardo Salazar González - Pontificia Universidad Católica de Chile
	Método multi-residuo para la identificación y cuantificación de pesticidas en agua superficial por UHPLC/ESI-Q-Orbitrap-MS Elizabeth González Mateus - Corporación Autónoma Regional de Cundinamarca, Colombia	Transformación catalítica de alcohol fusel utilizando óxidos metálicos mixtos Julieth Orduña Ortega - Universidad Santiago de Cali, Colombia
10:30 - 11:00	Coffee Break	
11:00 - 12:50	Transformación catalítica de alcohol isoamílico y etanol utilizando óxidos metálicos mixtos sustituidos con Zn-Cu y Zn-Ni Nicolas Briceño Lopez - - Universidad Santiago de Cali, Colombia	Degradación fotocatalítica de acetamiprid por óxidos mixtos de titania-sílice Nicolas Eduardo Penagos - Universidad Nacional de Colombia
	Catálisis Heterogénea para la Valorización de Residuos de Café: Producción de Furfural, 5-Hidroximetilfurfural y Ácido Levulínico Kevin Suarez - Universidad el Bosque, Colombia	Obtención de un material adsorbente a partir de biomasa forestal y su empleo en la remoción de plaguicidas Rodrigo Sarria/M. Collazos - Universidad del Cauca, Colombia
12:50 - 14:00	Almuerzo	
14:00 - 15:50	Optimización de la degradación del colorante negro ácido 194 mediante el sistema peroximonosulfato activado con especies de cobalto Julio Andrés Cardona - Universidad de Caldas, Colombia	Distribución de Microplásticos en Litorales de las Playas del Caribe Colombiano Jorge Enrique Trilleras Vásquez - Universidad del Atlántico, Colombia
	Efecto de aluminio en daño oxidativo y sistema antioxidante en caña (Saccharum officinarum) bajo condiciones de la Amazonia Colombiana Gloria Magally Paladines Beltran - Universidad de la Amazonia, Colombia	Montaje y operación de composteras autónomas para el aprovechamiento de residuos Yohanna Cuasapud Irua - Universidad del Cauca, Colombia
	Reducción electroquímica del dióxido de carbono sobre electrodos de cobre modificados con Co/Cu para la obtención selectiva de metanol William Duvan Parra B. - Universidad del Cauca, Colombia	Isotermas y cinética de adsorción de Cr 3+ , Cr 6+ , Hg 2+ y Pb 2+ en fibra natural biosorbente Jaime Andrés Parra Reyes - Universidad del Cauca, Colombia
15:50 - 16:15	Coffee Break	
16:15 - 18:00	Procesos de Adsorción de Fósforo y Magnesio en residuo del procesamiento de Fique como un posible uso de biofertilizante Javier Fuli - Universidad del Cauca, Colombia	Percepción de los estudiantes universitarios de los efectos del cambio climático en la seguridad alimentaria 2023 Eulalia Jurado - Universidad Nacional Federico Villarreal, Perú
	Estudio de la cinética de liberación de fertilizantes a partir de micro partículas de biocarbón impregnadas con fertilizantes y encapsuladas en perlas de alginato de calcio Patricio Muñoz - Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Perú	Revisión de la Titulación de Boehm en la Determinación de Grupos Funcionales Oxigenados en Biocarbones Javier Silva Agredo - Universidad de Antioquia, Colombia
	Evaluación de la capacidad bioestimulante de microalgas nativas de las regiones de Barú y Alanje, Provincia de Chiriquí Andrea Polo - Universidad Autónoma de Chiriquí	Actividad antioxidante y contenido de compuestos polifenólicos en diferentes variedades de caña (Saccharum officinarum L.), cultivadas en la Amazonia Colombiana Liceth Natalia Cuellar Álvarez - Universidad de la Amazonia,

Jueves 3

LOBBY CENTRO DE CONVENCIONES SORTIS HOTEL

Química Analítica (QMA)		
8:30 - 10:30	Síntesis y Caracterización de composites de óxido de grafito-CuO. Electrocatálisis de 2.4 dinitrofenol. Abel Balbin - Universidad de la Habana, Cuba	Evaluación de métodos alternativos para la cuantificación de nitratos en aguas de consumo humano Leonardo Beltrán Angarita - Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia
	Determinación de iones en aguas termales de la región cafetera de Colombia mediante cromatografía de intercambio iónico Yelicza Marin Giraldo - Universidad de Caldas, Colombia	Determinación de Carbohidratos No Estructurales Totales en Híbridos Mejorados de Urochola humidicola mediante espectroscopia Uv-Vis Lis Vanesa Ocoró - Alianza Bioversity & CIAT (Centro Internacional de Agricultura Tropical), Colombia
10:30 - 11:00	Coffee Break	
11:00 - 12:50	Efecto del tratamiento térmico sobre la microestructura y cristalinidad de hidroxiapatita obtenida de hueso cortical bovino Pablo Moreno - Universidad Industrial de Santander, Colombia	
	Análisis cualitativo de sustancias volátiles procedentes de envases plásticos destinados al contacto con alimentos en Panamá mediante Cromatografía de Gases acoplado a Espectrometría de Masas (GC-MS) Cristhopher Castillo - Universidad de Panamá	Validación del método de análisis de metales en granos por espectrometría de emisión atómica con plasma acoplado inductivamente (ICP-OES), Provincia de Panamá, República de Panamá Milka Mojica - Universidad Autónoma de Chiriquí

Química Forense y Toxicología		
11:00 - 12:50	Caracterización de psilocibina por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas Jorge Ruíz Jiménez - Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, México	Perfil Químico de Metales Pesados en Alimentos de Consumo Frecuente en la ciudad de Panamá: un Estudio Piloto Rosa Zambrano - Food Safety, Panamá
	Estudio Preliminar de Bisfenol A en botellas plásticas reutilizables en Panamá mediante LC-MS/MS no dirigido Felipe Barría - Universidad de Panamá	Estudio Piloto de la Exposición perinatal al DDE a través de leche materna en la cohorte materno-infantil: PA-MAMI Irene Castillero - Universidad de Panamá

Jueves 3

LOBBY CENTRO DE CONVENCIONES SORTIS HOTEL

Química Orgánica (ORG)		
8:30 - 10:30	Estudio cinético de la condensación de Knoevenagel entre la 5-metoxi-1-tetralona y el ácido glioxílico catalizada en medio ácido Roger Sebastian Guanoluisa Upaya - Universidad Central del Ecuador	Optimización de la actividad Biológica de Péptidos derivados de la Lactoferrina Bovina: Conjugación con motivos no proteicos como estrategia Daniel Castellar/ Ricardo Fierro - Universidad Nacional de Colombia
	Síntesis de Agentes Quelantes Derivados de Quinolilpirazolona Julio Bernardo Belmar Mellado- Universidad de Concepción, Chile	ORG-Auxiliares de Molienda Quirales en la Desimetrización de Oximas Cíclicas Via Reordenamiento de Beckmann Camilo Morales Manrique - Universidad de Los Andes, Colombia
	Síntesis de Algunas Bisamidas Derivadas de Pirazolona Julio Bernardo Belmar Mellado - Universidad de Concepción, Chile	Síntesis de nuevos híbridos quinolina-chalcona como posibles agentes antioxidantes e inhibidores de oxígeno singlete Arnold Rafael Romero Bohórquez - Universidad Industrial de Santander, Colombia
10:30 - 11:00	Coffee Break	
11:00 - 12:50	Síntesis y caracterización de 3-[(5-amino-1,3-dimetil-1H-pirazol-4-il)(4-metoxifenil)metil]-4-hidroxicumarina Carlos Santiago Ulloa Chacha - Pontificia Universidad Católica del Ecuador	Estudios de la Relación Cuantitativa Actividad-Estructura (QSAR) de análogos de Flavonoides con Potencial Actividad Biológica Contra la Línea Celular MCF-7 Omar Segundo Rodríguez Yanes - Universidad del Atlántico, Colombia
	Síntesis de derivados de curcumina con potencial neuroprotector Roni Fernández - INDICASAT, Panamá	Síntesis de derivados de benzotriazol, evaluación de sus propiedades fotofísicas y potencial aplicación en la generación de bioimágenes y OLED Eugenio Hernández Fernández - Universidad Autónoma de Nuevo León, México
12:50 - 14:00	Almuerzo	
14:00 - 15:50	Diseño y síntesis de un nuevo híbrido imidazol-3,4-dihidropirimidin-2(1H)-tiona John David Montañez Abril - Universidad Industrial de Santander, Colombia	Perfil químico de muestras de café de la variedad geisha determinados mediante UPLC-MS/MS Rigoberto Castillo - Universidad de Panamá
	Preparación de 2,3-diaril-2,3-dihidroquinazolin-4(1H)-onas, quinazolin-4(3H)-onas y su conversión a quino[2,1-b]quinazolin-12-onas. ¿Cuáles derivados se deberían preparar? Caso de estudio empleando un mapa auto-organizados de Kohonen basado en parámetros de Lipinski Nicole Ortiz - Universidad Industrial de Santander, Colombia	Híbridos de quinolina-benzotiazol como nuevos luminógenos AIE y quimiosensores fluorescentes eficientes para iones de cianuro Luis Alberto Illicachi Romero - Universidad Santiago de Cali, Colombia
	Aislamiento y caracterización de metabolitos secundarios del hongo endófito Lasiodiplodia iranensis F0619 Tiffany Milene Aparicio - Universidad de Panamá	

Jueves 3

LOBBY CENTRO DE CONVENCIONES SORTIS HOTEL

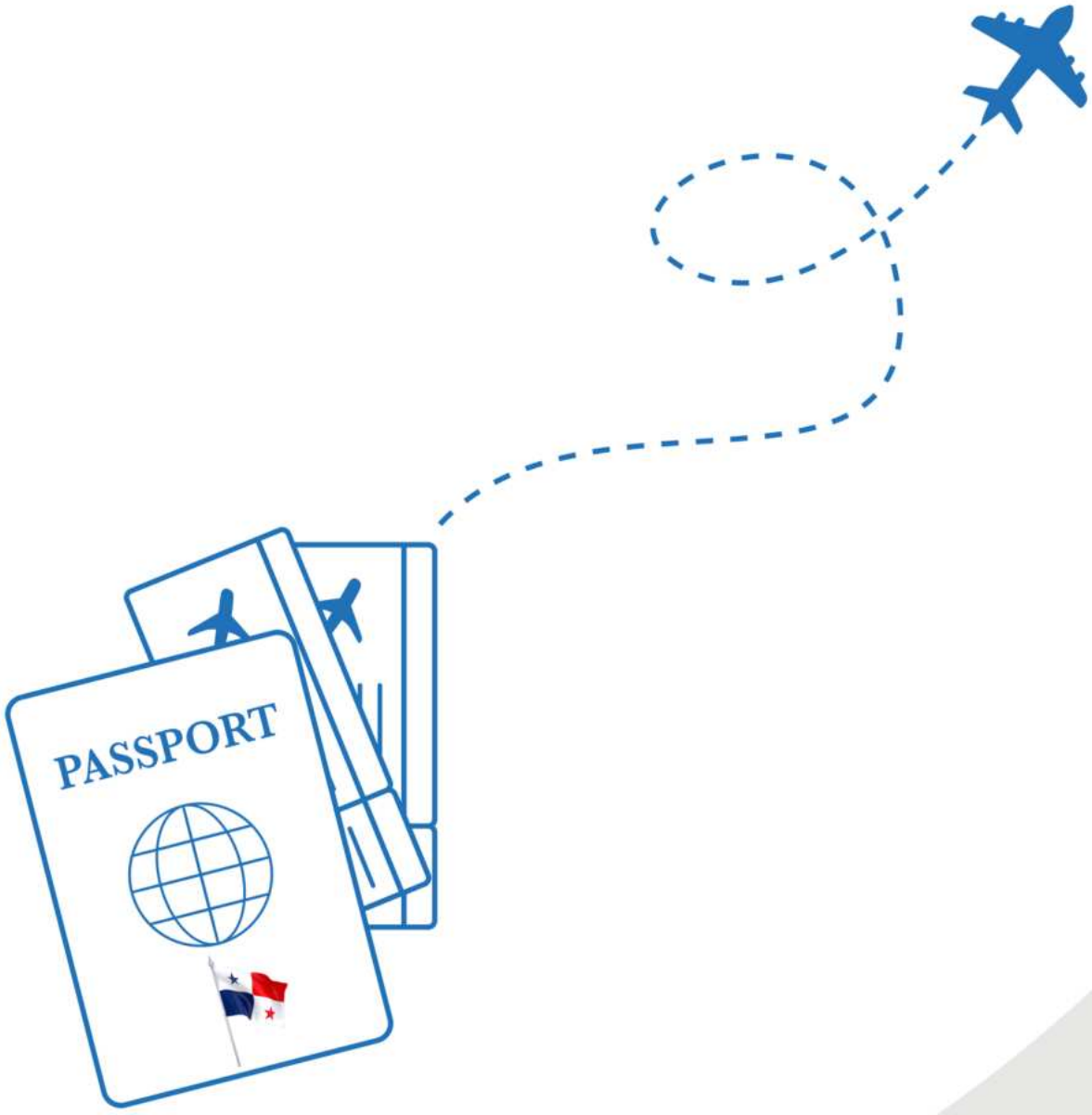
Productos Naturales y Farmacéuticos (PNF)		
8:30 - 10:30	Frutales silvestres infrautilizados de la Región Pacífica colombiana: estudio del contenido de fenoles y la capacidad antioxidante Ana M. León Sánchez/Harlen Torres Castañeda - Universidad Nacional de Colombia	Exploración de Propiedades Antifúngicas en Aceites Esenciales de Piper spp. frente a Moniliophthora roreri, patógeno del cacao (Theobroma cacao L.) Natalia V. Delgado B - Universidad Nacional de Colombia
	Análisis de los compuestos volátiles y de la actividad antioxidante del aceite esencial del orégano (Origanum vulgare L.) Guillermo Salamanca Grosso/Tapiero C.J. - Universidad del Tolima, Colombia	Simulación de las propiedades farmacocinéticas de cetocarotenoides provenientes de mamey (Pouteria sapota) Jessica Cruz Mora - INDICASAT, Panamá
	Efecto del solvente y el tiempo en la extraccion de compuestos fenolicos y actividad antioxidante del fruto amazonico Pouroma cecropiifolia Magally Paladines - Universidad de la Amazonia, Colombia	Caracterización metabolómica y evaluación de la actividad biológica de Urceolina caucana: un enfoque hacia la identificación de nuevas fuentes de compuestos bioactivos con aplicación en el tratamiento del Alzheimer Brandon Elí Ortíz Dominguez - Universidad ICESI, Colombia
10:30 - 11:00	Coffee Break	
11:00 - 12:50	Caracterización Química y actividad antioxidante de 2 aceites esenciales de Especies Aromáticas de Panamá Ana Best - Universidad de Panamá	Desarrollo de una formulación insecticida a partir de desechos agroindustriales basada en la aplicación de los diseños estadísticos de experimentos para el control de T.castaneum y S.zeamais. Valentina Guillen Garavito - Universidad Nacional de Colombia
	Análisis de la actividad biocida de las hojas del Schinus molle contra el Adioristus spp de la Quinua y perfil metabolómico por HPLC-MS Gloria Cosco Salguero - Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Perú	Diseño in silico y síntesis de inhibidores de la enzima LSD1 con potencial terapéutico contra cáncer de mama Deyssi N. Jaramillo - Universidad de Los Andes, Colombia
12:50 - 14:00	Almuerzo	
14:00 - 15:50	Estudio del potencial bioactivo de la mashua (Tropaeolum Tuberosum) enfocado en su actividad antioxidante y propiedades terapéuticas: una revisión bibliográfica Edwin Naula - Universidad Yachay Tech, Ecuador	Estudio del potencial inhibitorio de algunas especies del género Piper frente a lipasa pancreática Wendy Gómez - Universidad Nacional de Colombia
	Estudio térmico de la copigmentación de antocianinas y su efecto en la inhibición de estrés oxidativo Julio Cesar Santiago Contreras - Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Perú	Actividad antioxidante y microbiana de esteroles de tres fuentes de productos naturales Luisa Casis - Universidad de Panamá
	Caracterización química preliminar de extractos de algas del Caribe Colombiano con potencial actividad antimicrobiana frente a cepas de Staphylococcus epidermidis y Cutibacterium acnes Ingrid Andrea Rodríguez Martínez - Universidad Nacional de Colombia	Extracción, análisis por UPLC-MS y evaluación de la actividad biológica de carotenoides en huevos, algas y arándanos Abraham Mordock - Universidad de Panamá
15:50 - 16:15	Cofee Break	
16:15 - 18:00	Comparación de la Diversidad Metabólica de las Hojas de Dos Variedades de Coffea arabica cultivadas en Panamá Juan Fernández - INDICASAT, Panamá	Selección Asistida Computacionalmente de Compuestos Fenólicos Antibacteriales Dirigidos a Piruvato Quinasa en Staphylococcus aureus resistente a la meticilina (MRSA) Ericsson Coy-Barrera - Universidad Militar Nueva Granada, Colombia
	Bioprospección de hongos endófitos del café panameño: Potencial Bioactivo y Aplicaciones en Salud Humana de las cepas GEF-7-34.1 y GEF7-28.14 Randy Mojica-Flores - Indicasat, Panamá	

Jueves 3

LOBBY CENTRO DE CONVENCIONES SORTIS HOTEL

	Química Teórica Computacional (QTC)	Química Física (QMF)	Química Inorgánica (QMI)
11:00 - 12:50	Desarrollo de Aplicación para Solucionar la Ecuación De Van Der Waals Asistida por un Modelo de Lenguaje Anibal Hernández/Evelyn Mosquera - Universidad de Panamá	Determinación de las fracciones f libre de retroceso en ferritas CuFe2O4 mediante espectroscopía Mössbauer Eduardo Edgardo Chung NG - Universidad de Panamá	Síntesis de complejos de coordinación derivados de ligandos azólicos con potencial actividad anti-plasmodium Sergio A. Patiño - Universidad de Los Andes, Colombia
		La sinergia de Microsoft Excel y la Química Física: Soluciona la ecuación de Van Der Waals con eficiencia Karen Marquez/Jhonny Jimenéz - Universidad de Panamá	Síntesis y Caracterización de [Ag 2 (DDTC)(Sac)] n Mario Ceroni Galloso - Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Perú

36º CLAQ 2024
PANAMÁ
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA • CIUDAD DE PANAMÁ


PASSPORT

37° CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA

CLAQ

LIMA - PERÚ

2026

31° CONGRESO PERUANO DE QUÍMICA

SOCIEDAD QUÍMICA DEL PERÚ

FLAQ
Federación Latinoamericana de Asociaciones Químicas

ISBN 978-9962-8603-0-3