XIX CONGRESO COLOMBIANO DE QUÍMICA

Alianza por un desarrollo sostenible

2 al 6 de Octubre, Bogotá

Universidad de los Andes Colombia

Facultad de Ciencias

Departamento de Química

Asociación Química Colombiana

CPQCOL Consejo Profesional de Química Colombia

Fundación Universitaria Juan N. Corpas

ACS ON CAMPUS

ACS Chemistry for Life®

ACS Publications

CAS

MEMORIAS

La Universidad de los Andes y el Departamento de Química les dan la bienvenida al XIX Congreso Colombiano de Química. Hemos recibido la batuta de la Universidad del Cauca, quienes organizaron exitosamente la versión XVIII Congreso Colombiano de Química en el 2019, en la ciudad de Popayán. Después de 4 años y una pandemia, es un honor para nosotros ser los anfitriones de toda la comunidad afín a la Química.

Agradecemos a todos los participantes el interés por divulgar conocimiento, intercambiar ideas y fortalecer relaciones interinstitucionales y personales en los ámbitos de la educación, la investigación y el sector productivo.

En esta ocasión hemos querido aprovechar el encuentro de investigadores, educadores y profesionales, para promover un tema de vital importancia para nuestra sociedad: los Objetivos de Desarrollo Sostenible de las Naciones Unidas, también conocidos como los ODS.

Estos importantes Objetivos representan un llamado universal a la acción para proteger el planeta y asegurar que todas las personas gocen de paz y prosperidad para el año 2030. Son 17 objetivos ambiciosos que abordan una amplia gama de desafíos, desde la erradicación de la pobreza hasta la promoción de la igualdad de género, la acción contra el cambio climático y la preservación de nuestros ecosistemas.

En este contexto, la Química con seguridad tendrá un papel fundamental. Siendo la ciencia más aplicada, la química ha jugado un rol central en muchos avances tecnológicos y científicos a lo largo de la historia. Por lo cual, hoy en día, la Química se torna esencial en la consecución de los ODS. Entre estos objetivos, se pueden destacar algunos en los cuales la Química brillará con toda seguridad, como:

- La consecución de agua limpia y saneamiento.
- El impulso a la Energía Asequible y No Contaminante.
- La mitigación al cambio climático, desde la captura de carbono hasta las energías de baja producción de carbono.
- El desarrollo industrial y de infraestructura, fundamentado en la innovación.
- Y no menos importante para nosotros, siendo Colombia uno de los países más biodiversos del mundo, la preservación de los ecosistemas.

En este contexto, este Congreso se ha organizado en XVI áreas temáticas, todas relacionadas con el desarrollo de la química y los ODS.

Por lo tanto, buscamos que este congreso sea un punto de encuentro para compartir conocimientos, experiencias y mejores prácticas en el campo de la química sostenible. Confiamos en que las discusiones y colaboraciones que surjan aquí tendrán un impacto significativo en la forma en que avanzamos hacia un futuro mejor.

Gracias a todos por su compromiso y su participación.

Comité Organizador

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

PLENARISTAS INVITADOS



Dra. Prof. Parastoo Azadi
USA



Dr. Prof. Janusz Pawliszynn
CANADÁ



Dr. Prof. Vanessa Fierro
FRANCIA



Dr. Prof. Luis Blancafort
ESPAÑA



Dr. Prof. Michael KC Tam
CANADÁ



Dr. Prof. José Hernández
COLOMBIA



Dr. Prof. Evandro Fang
NORUEGA



Dr. Prof. Andrés Caraballo
USA

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Tabla de contenido

PRESENTACIONES MODALIDAD ORAL 30

BIOQUÍMICA Y TECNOLOGÍA 31

VII-1-O ***EVALUACIÓN DE LA MODIFICACIÓN QUÍMICA DE LA LIPASA THERMOMYCES LANUGINOSUS PARA LA OBTENCIÓN DE DERIVADOS GLIOXIL-AGAROSA APLICADOS A LA PRODUCCIÓN DE BIODIESEL.*** 31

VII-2-O ***CARACTERIZACIÓN DE BIOBASADOS FOTOACTIVOS A BASE DE ALMIDÓN MODIFICADO Y SU EFECTO SOBRE LA CONSERVACIÓN DEL QUESO PAIPA.*** 33

VII-3-O ***PRODUCCIÓN DE ANTICUERPOS POLICLONALES IGY ANTI-SPCAS9 PARA SU USO EN INVESTIGACIÓN CRISPR/CAS*** 34

VII-8-O ***USO DE MACHINE LEARNING PARA LA PREDICCIÓN DE PREECLAMPSIA CON ESPECTROMETRÍA DE MASAS MALDI-TOF.*** 35

VII-310-O ***MECANISMOS DE INMOVILIZACIÓN DE PLOMO POR BACTERIAS UREOLÍTICAS Y SU POTENCIAL PARA LA REMEDIACIÓN DEL METAL*** 36

VII-343-O ***ENFOQUE BIOFÍSICO SOBRE LA ACTIVIDAD ANTITUMORAL DE LA CROTALICIDINA EN EXTRACTOS Y MODELOS DE MEMBRANA CELULAR DE CÁNCER DE SENO*** 37

VII-378-O ***DEGRADACIÓN BILÓGICA DE SOLUCIONES DE CIANURACIÓN: RETOS Y OPORTUNIDADES PARA MICROORGANISMOS Y SUS ENZIMAS*** 38

VII-410-O ***CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL Y ACTIVIDADES ANTICOAGULANTES Y ANTITROMBÓTICAS DE GLICOCONJUGADOS SULFATADOS*** 39

VII-479-O ***UN ACERCAMIENTO IN SILICO DE LA SELECTIVIDAD Y AFINIDAD DE LA COLISTINA (POLIMIXINA E) A NIVEL INTERMOLECULAR SOBRE LOS MODELOS DE MEMBRANA DE STAPHYLOCOCCUS AUREUS Y ESCHERICHIA COLI MEDIANTE DINÁMICA MOLECULAR*** 40

VII-494-O ***PRODUCCIÓN DE ANTICUERPOS RECOMBINANTES CONTRA LA PROTEÍNA NAD QUINASA DE PLASMODIUM FALCIPARUM: IMPLEMENTANDO LA TECNOLOGÍA PHAGE DISPLAY*** 41

VII-504-O ***EFECTO DE DERIVADOS IMIDAZOLICOS SOBRE LA ACTIVIDAD ENZIMÁTICA DE LA NICOTINAMIDA MONONUCLEOTIDO ADENILIL TRANSFERASA DE LEISHMANIA BRAZILIENSIS (LBNMNAT), ACERCAMIENTO BIOINFORMÁTICO Y EXPERIMENTAL.*** 42

VII-511-O ***ESTUDIO DE LA TERAPIA COMBINATORIA DOXORRUBICINA + MEDICAMENTO NO CONVENCIONAL EN CÁNCER COLORRECTAL*** 43

ENERGÍAS RENOVABLES 44

X-225-O ***ANÁLISIS DE DEGRADACIÓN ÓPTICA DE PIGMENTOS NATURALES (SYZYGIUM PANICULATUM – BIXA ORELLAN) Y SINTÉTICOS (RUTENIO N719) PARA LA SENSIBILIZACIÓN DE CELDAS SOLARES DSSC*** 44

X-330-O ***DESARROLLO DE MEMBRANAS PEM A BASE DE POLIETERETERCETONA SULFONADA (PEEK-S) PARA BATERÍAS ESTACIONARIAS DE FLUJO REDOX*** 45

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

X-349-O ***Estudio de Parámetros Críticos en el Proceso de Ensamblaje y Caracterización sobre el Rendimiento de Celdas Solares Sensibilizadas por Pigmentos*** 46

X-359-O ***Síntesis electroquímica de películas de Polipirrol/La(OH)3 y estudio de sus propiedades como capacitor electroquímico*** 47

ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA 48

XII-19-O ***Implementación De Una Estrategia De Aprendizaje Guiada Por Preguntas Y Evaluada Por Medio De Un Cuaderno Electrónico Para Los Laboratorios De Fisicoquímica De La Escuela De Química.*** 48

XII-258-O ***Tiflotecnología aplicada a la enseñanza de la química para estudiantes con discapacidad visual*** 49

XII-259-O ***Potenciómetro Parlante para Estudiantes con Discapacidad Visual*** 50

XII-469-O ***7-FeSTiVAL de Química ACS 2023 del Capitulo Bogotá*** 51

FISICOQUÍMICA 52

VIII-24-O ***Mejorada eficiencia y propiedades fotovoltaicas de celdas solares invertidas de perovskita a través de la capa transportadora huecos de NiOx dopada con In por deposición electroquímica*** 52

VIII-25-O ***Fisicoquímica del Interior de la Tierra: Avances en Colombia*** 53

VIII-26-O ***Efecto del pH en la Actividad Antioxidante del Ácido Úrico sobre el Triptófano*** 54

VIII-27-O ***Evaluación de la eficiencia fotoelectroquímica de fotoánodos de CeO2 para la degradación de ciprofloxacino*** 55

VIII-235-O ***Fabricación de Plataformas de Óxidos Semiconductores Nanoestructurados a partir de Películas de Cobre*** 56

VIII-445-O ***Descripción Microcinética de la Reacción de Electro-oxidación de Ácido Fórmico*** 57

VIII-457-O ***Estudio de la cinética de adsorción para Brij58 en la interfase vapor saturado-disolución acuosa a 298.15 K por método cuasiestático de volumen de gota.*** 58

VIII-517-O ***Efecto del aumento de cadena sobre las propiedades volumétricas de resorcin[4]arenos en solución.*** 59

VIII-518-O ***Propiedades molares estándar de resorcinarenos aminados en agua y DMSO*** 60

PETROQUÍMICA Y GEOQUÍMICA 61

XVI-31-O ***Caracterización Geoquímica de Carbones Colombianos Antracíticos y Semiantracíticos*** 61

XVI-34-O ***Estudio de Elementos de Tierras Raras Presentes en Patios de Cenizas de Carbón de Termoeléctricas de Colombia*** 62

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XVI-35-O ***EFECTO DE LA SALINIDAD DEL AGUA EN LA INTERACCIÓN CRUDO PESADO COLOMBIANO/ROCA: UN ESTUDIO EXPERIMENTAL*** 63

XVI-322-O ***CARACTERIZACIÓN GEOQUÍMICA DE CIRCONES MEDIANTE LA-ICP-MS-Q*** 64

XVI-499-O ***INVESTIGACIÓN DE LAS POSICIONES DE IRRADIACIÓN DEL REACTOR NUCLEAR IAN-R1 DEL SERVICIO GEOLÓGICO COLOMBIANO PARA DATACIÓN CON TÉCNICAS DE TERMOCRONOLOGÍA*** 65

PRODUCTOS NATURALES 66

IX-36-O ***PERFIL METABÓLICO DE UNA FRACCIÓN DE TRITERPENOS PENTACÍCLICOS DE CECROPIA ANGUSTIFOLIA Y SU EVALUACIÓN PRECLÍNICA EN BIOMODELOS DE PREDIABETES TIPO 2*** 66

IX-37-O ***ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA Y ANTIOXIDANTE DE HIDROGELES A BASE DE EXTRACTOS ENCAPSULADOS DE ALOE VERA Y CÚRCUMA*** 67

IX-38-O ***COMPARACIÓN DE MÉTODOS DE EXTRACCIÓN NO CONVENCIONALES EN LA CARACTERIZACIÓN QUÍMICA Y ACTIVIDAD REPELENTE DEL ACEITE ESENCIAL DE CROTON MALAMBO H. KARST. (EUPHORBIACEAE)*** 68

IX-39-O ***DIVERSIDAD FITOQUÍMICA DEL CANNABIS COLOMBIANO: UN MUNDO INEXPLORADO DE OPORTUNIDADES TERAPÉUTICAS*** 69

IX-40-O ***OBTENCIÓN DE METABOLITOS CON POTENCIAL APLICACIÓN COSMÉTICA A PARTIR DE MACROALGAS MARINAS COLOMBIANAS POR MEDIO DE EXTRACCIÓN CON SOLVENTES EUTÉCTICOS NATURALES (NADES)*** 70

IX-42-O ***IDENTIFICACIÓN QUÍMICA DE METABOLITOS SECUNDARIOS DE ASTROPECTEN MARGINATUS Y EVALUACIÓN DE SU ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA*** 71

IX-43-O ***DESARROLLO DE UNA BIBLIOTECA DE PRODUCTOS NATURALES AISLADOS Y CARACTERIZADOS DE ESPECIES VEGETALES ESTUDIADAS EN LA REGIÓN DEL EJE CAFETERO, COLOMBIA*** 72

IX-44-O ***FRACCIONES CONTROLADAS QUÍMICAMENTE. LA PLATAFORMA IDEAL EN COLOMBIA PARA EL DESARROLLO DE BIOPRODUCTOS*** 73

IX-46-O ***POTENCIAL ANTICANCERIGENO DEL CANNABINOIDE CBG PRESENTE EN EXTRACTOS ETANOLICOS DE CANNABIS*** 74

IX-47-O ***METABOLITOS ESPECIALIZADOS DETECTADOS POR GC-MS EN HOJAS FRESCAS DE DURANTA ERECTA L., VERBENACEAE*** 76

IX-237-O ***DISEÑO EXPERIMENTAL PLACKETT-BURMAN: OPTIMIZACIÓN DEL PRETRATAMIENTO DE CÁNNABIS PARA LA CUANTIFICACIÓN DE METALES POR ICP-MASAS*** 77

IX-252-O ***EXTRACCIÓN ASISTIDA POR ULTRASONIDO DE COMPUESTOS BIOACTIVOS DE CANNABIS SATIVA. L EMPLEANDO DISOLVENTES EUTÉCTICOS PROFUNDOS BASADOS EN MENTOL*** 78

IX-265-O ***ESTUDIO DEL POTENCIAL FUMIGANTE DE 24 ACEITES ESENCIALES PARA EL CONTROL DE THRIPS (THYSANOPTERA: THRIPIDAE).*** 79

IX-289-O USO DE GNPS Y METABOANALYST PARA LA COMPARACIÓN E IDENTIFICACIÓN DE HUELLAS DACTILARES DEL PERFIL VOLÁTIL DE RONES COLOMBIANOS Y CACHAÇAS BRASILERAS MEDIANTE HS-SPME-GC-MS 80

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-337-O ***CARACTERIZACIÓN QUÍMICA Y COMPUTACIONAL DE COMPUESTOS PRESENTES EN ALSTONIA SCHOLARIS (DITTA)*** 82

IX-427-O ***ANÁLISIS DE POLIFENOLES Y CAPSAICINOIDES PRESENTES EN VARIEDADES DE AJÍES (CAPSICUM SP.) CULTIVADOS EN COLOMBIA MEDIANTE HPLC-DAD-MSN*** 84

IX-447-O ***METABOLITOS ESPECIALIZADOS DEL FRUTO DE CLAVIJA LEHMANNII MEZ. (PRIMULACEAE)*** 86

IX-497-O ***OBTENCIÓN DE UNA CREMA FACIAL A PARTIR DE EXTRACTO DE CIDRA (SECHIUM EDULE JACQ./SW. VA. VIRENS LEVIS) Y ACIDO SALICÍLICO PARA EL CONTROL DE ACNÉ VULGARIS*** 87

QUÍMICA AMBIENTAL 88

XIII-60-O ***ESTUDIO GEOQUÍMICO DE CADMIO Y OTROS ELEMENTOS POTENCIALMENTE PELIGROSOS EN SUELOS ASOCIADOS A CULTIVOS DE CACAO EN YACOPÍ – CUNDINAMARCA*** 88

XIII-61-O ***INFLUENCIA DE UN BOCASHI A PARTIR DE RESIDUOS DE CAFÉ CASTILLO SOBRE EL CRECIMIENTO DE RÁBANOS*** 89

XIII-65-O ***EQUILIBRIO, TERMODINÁMICA Y CINÉTICA DE LA REMOCIÓN DEL COLORANTE CRISTAL VIOLETA EMPLEANDO SÍLICE NATURAL COMO ADSORBENTE*** 90

XIII-253-O ***ESTUDIO DE LA INFLUENCIA DE LA MORFOLOGÍA DE SUSTRATOS DE COBRE EN EL CRECIMIENTO DE NANOTUBOS DE CARBONO A PARTIR DE MATERIA PRIMA RECICLADA*** 91

XIII-279-O ***PREDICCIÓN DE LA POSIBLE RUTA DE DEGRADACIÓN DEL SULFAMETOXAZOL A PARTIR DE LOS PRODUCTOS GENERADOS EN UN SISTEMA UV/H2O2/CL2*** 92

XIII-281-O ***CINÉTICA DE LA PRODUCCIÓN DE BIOGAS GENERADO POR BIODIGESTIÓN ANAERÓBICA DE EXCRETAS PORCINAS EN PROTOTIPOS BIODIGESTORES DE LABORATORIO*** 93

XIII-296-O ***DEPOLIMERIZACION DE PET-POSCONSUMO CON PROPILENGLICOL EMPLEADO UN CATALIZADOR DERIVADO DE UNA HIDROTALCITA A BASE DE NIZNAL*** 94

XIII-308-O ***ADSORCIÓN DE SULFATO POR EFECTO MEMORIA DE UNA HIDROTALCITA SOPORTADA EN CARBÓN ACTIVADO*** 95

XIII-366-O ***IMPLEMENTACION DE UN SISTEMA FOTO-ELECTRO-FENTON PARA LA REMOCION DE COMPUESTOS FARMACÉUTICAMENTE ACTIVOS PRESENTES EN AGUA DE RIEGO DE SABANA DE BOGOTA.*** 96

XIII-377-O ***CARACTERIZACIÓN MINERALÓGICA Y FISICOQUÍMICA DE ARCILLAS DE REFERENCIA COMO BASE PARA LA EVALUACIÓN DEL POTENCIAL DE MATERIALES ARCILLOSOS EN APLICACIONES AMBIENTALES.*** 97

XIII-379-O ***ESTUDIO ISOTÓPICO DE CARBONO (Δ13C) EN MATERIAL PARTICULADO PM2.5 COLECTADO SOBRE FILTROS DE CUARZO PARA EVALUAR EL ORIGEN DE LA CONTAMINACIÓN ATMOSFÉRICA DEL VALLE DE ABURRÁ*** 98

XIII-516-O ***MICROPLÁSTICO*** 99

QUÍMICA ANALÍTICA 100

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-82-O ***DESARROLLO DE UN SISTEMA MECATRÓNICO PARA MONITOREO AMBIENTAL DE GASES DE EFECTO INVERNADERO Y COMPUESTOS ORGÁNICOS VOLÁTILES MEDIANTE SENSÓRICA Y TELEMETRÍA APLICADA A UN DRON*** 100

IV-83-O ***ANÁLISIS DE CONTAMINANTES EMERGENTES TIPO PRODUCTOS FARMACÉUTICOS Y DE CUIDADO PERSONAL EN PESCADO RHAMDIA WAGNERI MEDIANTE MSPD/GC-MS*** 101

IV-84-O ***DETECCIÓN DE (1-[(2-CLOROFENIL) (METILIMINO) METIL] CICLOPENTANOL COMO PRECURSOR DE KETAMINA EN MUESTRAS DE LA DROGA ILÍCITA "TUCIBI"*** 102

IV-268-O ***CAROTENOID-TARGETED METABOLOMICS DE STAPHYLOCOCCUS AUREUS MEDIANTE LC-MS/MS: METABOLITOS ASOCIADOS CON TOLERANCIA AL ESTRÉS OXIDATIVO Y ADAPTACIÓN HOMEOVISCOSA*** 103

IV-380-O ***ESTUDIO DE COMPLEJOS COBRE-GLIFOSATO-CLORURO FORMADOS DURANTE LA DETECCIÓN ELECTROQUÍMICA DE GLIFOSATO*** 104

IV-411-O ***APLICACIÓN DE ESPECTROMETRÍA DE MASAS EN TÁNDEM CON PLASMA DE ACOPLAMIENTO INDUCTIVO - ABLACIÓN LÁSER- ICP-MS-LA*** 105

IV-446-O ***OPTIMIZACIÓN DE CONDICIONES PARA LA DETERMINACIÓN DE COMPUESTOS ORGÁNICOS VOLÁTILES EN THEOBROMA GRANDIFLORUM (COPOAZÚ) MEDIANTE HS-SPME-GC-MS*** 106

IV-477-O ***EVALUACIÓN DE LA BIO-ADSORCIÓN DE COBRE, ZINC Y MERCURIO PRESENTE EN AGUA SOBRE RESIDUOS DE CÁSCARA DE PLÁTANO (MUSA PARADISIACA L.)*** 107

IV-520-O ***USO DE UNA RAMPA LENTA DE ATOMIZACIÓN EN LA TÉCNICA DE ABSORCIÓN ATÓMICA DE HORNO DE GRAFITO DE FUENTE CONTINUA (HR-CS-GFAAS) PARA LA DETERMINACIÓN SIMULTANEA DE CD Y NI EN MUESTRAS DE CHOCOLATE EN POLVO*** 109

QUÍMICA DE ALIMENTOS Y AGROINDUSTRIA 111

XIV-94-O ***EVALUACIÓN DEL IMPACTO DEL SECADO EN LA QUÍMICA VOLÁTIL DE PHYSALIS PERUVIANA*** 111

XIV-98-O ***CONDICIONES DE EXTRACCIÓN Y DEGRADABILIDAD DE CAPSAICINOIDES EN OLEORRESINAS DE CAPSICUM CHINENSE CON ALTO POTENCIAL AGROINDUSTRIAL.*** 112

XIV-99-O ***INCORPORACIÓN DE OLEORRESINA CAPSICUM EN MATRICES SÓLIDAS: UNA ESTRATEGIA PARA AUMENTAR ESTABILIDAD Y FACILITAR SU APLICACIÓN EN ALIMENTOS FUNCIONALES*** 113

XIV-100-O ***CARACTERIZACIÓN QUÍMICA POR HS-SPME/GC-MS DE LOS VOLÁTILES DE UN TIPO DE CAFÉ ESPECIAL OBTENIDO POR UN BENEFICIO SIMILAR A HONEY Y CULTIVADO EN LA FINCA "LA MINA" DEL MUNICIPIO DE BUESACO – NARIÑO - COLOMBIA.*** 114

XIV-356-O ***EVALUACIÓN DE LA FERTILIDAD DE SUELOS DE LA ALTILLANURA COLOMBIANA EN SISTEMAS DE SOYA-MAÍZ.*** 115

XIV-368-O ***ANÁLISIS COLORIMÉTRICO A PARTIR DE IMÁGENES RGB: UNA HERRAMIENTA EN PYTHON PARA LA DETECCIÓN DE CONTAMINANTES EN PLANTAS*** 116

XIV-414-O ***CARACTERÍSTICAS NUTRICIONALES Y BIOACTIVOS DE LA COLECCIÓN CENTRAL COLOMBIANA DE SOLANUM TUBEROSUM GRUPO PHUREJA Y DE CRIOLLA OCARINA, CRIOLLA SUA PA Y CRIOLLA DORADA*** 117

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA DE MATERIALES 118

V-117-O Nanocompuestos Fluorescentes Basados en Puntos Cuánticos de Sulfuro de Cadmio y Matrices Poliméricas para su Aplicación como Sensor Visual en la Detección de Glifosato 118

*V-118-O **Identificación y Clasificación de Rocas de Jade Mediante el Uso de Imágenes Hiperespectrales y RGB*** 119

*V-120-O **Materiales Transportadores de Huecos Para Celdas Solares de Perovskita*** 120

*V-122-O **Materiales Transportadores de Huecos Basados en BODIPY para Celdas Solares de Perovskita de Configuración Invertida Eficientes*** 121

*V-123-O **Investigación de las propiedades conductoras de los derivados electro-polimerizados de tiofeno y pirrol: correlación entre parámetros experimentales y teóricos*** 122

*V-236-O **Obtención y Caracterización Morfológica de Matrices Nanoestructuradas de Oro*** 123

*V-345-O **Síntesis, caracterización, estudios estructurales y computacionales de 3 perovskitas híbridas bidimensionales.*** 124

*V-367-O **Mejora en la estabilidad y propiedades fotovoltaicas en celdas solares de perovskita con arquitectura invertida (IPSCs)*** 125

QUÍMICA INDUSTRIAL, TECNOLOGÍA E INNOVACIÓN 126

*XI-129-O **Síntesis de Nanomateriales de Carbono Fluorescentes (NCFs) a Partir de Coque de Petróleo y su Potencial Uso como Trazador de Fluidos de Fractura*** 126

*XI-130-O **Desarrollo de un Ingrediente con Cannabinoides para la Industria de Bebidas Tipo "Soft Drink"*** 127

*XI-230-O **Síntesis de Nuevo Farmacóforo ARA-II, a partir del Rediseño in-silico Basado en la Afinidad de los Diferentes Blancos Terapéuticos y Evaluación por Cribado Virtual*** 128

QUÍMICA INORGÁNICA 130

*II-132-O **Síntesis de Nanopartículas de Cobre y Plata Mediante Reducción Química y Evaluación de su Actividad Antibacteriana contra Ralstonia solanacearum*** 130

*II-133-O **Espectroscopia Infrarroja para la Determinación de la Composición Química de las Estratificaciones de Urolitos en Caninos*** 131

*II-134-O **Estudio Estructural y Teórico de Nuevos Metalo-Fármacos para su Uso como Posible Agente Anti-Diabético*** 132

*II-372-O **Carbenos N-Heterocíclicos: De la Reactividad a Estabilizantes de Nanopartículas para Aplicaciones Catalíticas en Agua*** 133

*II-440-O **Síntesis de Complejos de Cobalto(III) y Cromo(III) como Catalizadores Single- Component para la Activación de CO2 y Epóxidos*** 134

*II-474-O **Un viaje a través de las propiedades anticancerosas de los complejos ciclometalados*** 135

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

II-486-O ***Evaluación de la actividad catalítica de g-C3N4 Modificados con Ni2+, Mn2+ y Cu2+ para la Degradación de Fármacos en Medio Acuoso.*** 136

II-487-O ***Metalofarmacos. Metales Pesados: Amigos o Enemigos?*** 137

II-492-O ***Reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck y reacciones de alquilación de metilcetonas con complejos de paladio con ligantes azoazometinonitrofenilpirazol*** 138

II-512-O Estudios en disolución y evaluación de la actividad antimicrobiana de complejos de Cu(II) 139

QUÍMICA MEDICINAL 140

XV-143-O ***Síntesis y Caracterización de Estructuras Metal-Orgánicas de Cobre (CuMOFs) Empleando un Péptido Sintético como Bio-ligando para Aplicaciones en la Entrega de Fármacos*** 140

XV-144-O ***El Gas Radón y sus Efectos en la Salud Humana*** 141

XV-145-O ***Efecto Antiproliferativo de Extractos de Ipomoea batatas (L.) Lam. (Convolvulaceae) Sobre Células Cancerígenas Orales*** 142

XV-146-O ***Generación de Moduladores Alostéricos Positivos para el Receptor Nicotínico de Acetilcolina Subtipo a7 Humano. Una Alternativa en el Tratamiento de la Enfermedad de Alzheimer.*** 143

XV-147-O ***Diseño de Análogos Quinolínicos Metoxilados con Potencial Leishmanicida y Anti-Trypanosoma Cruzi*** 144

XV-149-O ***Perfil Anticonvulsivante en Ratones CD-1 de Derivados de Isobenzofuranona Provenientes del DiFAC*** 145

XV-150-O ***Efecto de los Péptidos ATRA-1, LL-37 y Daptomicina sobre el Comportamiento Termotrópico de Modelos Representativos de la Membrana de Staphylococcus aureus.*** 146

XV-151-O ***Desarrollo de Andamios Flexibles de Policaprolactona/nanotubos de Carbono para ser Utilizados en Recuperación de la Función Contráctil, Ensayados en Músculo Estriado*** 147

XV-152-O ***Actividad Antiperiodontal de un Extracto Crudo Obtenido de los Residuos de la Industria Micro Cervecera*** 148

XV-240-O ***Del Diseño In-Silico A La Comprobación In-Vitro: Implementación De LBVS y SBVS*** 149

XV-394-O ***Flavona aislada de Chromolaena leivensis muestra importante efecto antiinflamatorio in vivo y en modelo in silico.*** 150

XV-407-O ***Síntesis de amidas derivadas del ácido 2-benzofuranilacético y su potencial actividad citotóxica frente a líneas celulares tumorales K562 y U937.*** 151

XV-437-O ***Contenido de cannabinoides e inhibición de acetilcolinesterasa, de extractos etanólicos de Cannabis sativa no psicoactiva cultivada en el Cauca*** 152

XV-495-O ***Síntesis de un Nuevo Inhibidor no Nucleósido de la Transcriptasa Inversa (ITI-NN) para el Tratamiento de VIH-1 Diseñado a través de Acoplamiento Molecular y un Modelo QSAR*** 153

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA ORGÁNICA 155

I-161-O ***Síntesis, Solvatofluorocromismo y Acidocromismo de Nuevos Derivados de 5-(3-cumarinil)isoxazoles*** 155

I-163-O ***Síntesis y Actividad Inhibidora sobre Enzimas Colinesterasas de Nuevos Híbridos Moleculares 4-Formamido Tetrahidroquinolinas Ancladas al Núcleo Heterocíclico 1,2,3-Triazol*** 156

I-164-O ***Síntesis Mecanoquímica de Amidas y Péptidos*** 157

I-165-O ***Síntesis y caracterización de una nueva serie de híbridos moleculares (E)-3-aril-2-(4-estirilquinolin-2-il)quinazolin-4(3H)-ona*** 158

I-166-O ***Síntesis multicomponente de 3-ciano-2(1H)-piridonas: Análisis espectroscópico, cristalográfico y evaluación de la actividad antitumoral*** 160

I-167-O ***Retos y perspectivas para la síntesis de nuevas moléculas con aplicación en la fabricación de dispositivos fotovoltaicos*** 162

I-190-O ***Desprotección Selectiva de Aminas Primarias Aromáticas, Usando la Reacción de Transamidación y Fuentes Sólidas de amoniaco*** 163

I-275-O ***Síntesis de amidas con potencial actividad antitumoral mediante la amidación directa vía catálisis heterogénea*** 164

I-339-O ***Oxidación con Permanganato de Potasio y Catalizador de Jacobsen de Δ5-esteroles: Colesterol y Estigmasterol 3-acetilados.*** 166

I-426-O ***Amination Reductiva Indirecta de Aldehídos Aromáticos con Hidróxido de Amonio*** 167

I-430-O ***Síntesis Y Caracterización De Derivados Pirazólicos De Iminas, Coordinación A Paladio, Y Evaluación Catalítica En Reacciones De Acoplamiento C-C Tipo Mizoroki-Heck En Medio Acuoso.*** 168

I-461-O ***Química y Propiedades de Pirazolo[1,5-a]pirimidinas: Un Enfoque Actual*** 170

I-463-O ***Activación de Sulfoxidos con Cloruro de Oxalilo y Halogenación Catalítica de Aromáticos*** 171

I-464-O ***Síntesis y Elucidación Estructural de Nuevos Derivados 5-O-aminoalquil-2-aril-3-metilbenzo[b]furánicos con una Promisoria Actividad Antitumoral*** 173

I-466-O ***Recientes Aplicaciones de Solventes Eutécticos y Aceites Esenciales en la Síntesis Sostenible de Compuestos Heterocíclicos*** 174

I-509-O ***Películas De Polihidroxibutirato (PHB)-Ácido Poliláctico (PLA) Como Reemplazo Al Polietileno En La Agroindustria*** 175

I-515-O ***Síntesis De Heterociclos: Un Viaje Hacia Nuevos Compuestos Anticancerígenos*** 176

QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL 178

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-193-O ***REPOSICIONAMIENTO IN SILICO DE FÁRMACOS PARA INHIBIR BLANCOS PROTEICOS DE TRYPANOSOMA CRUZI Y LEISHMANIA MAJOR*** 178

III-195-O ***ESTUDIO DFT DE LA DEGRADACIÓN DE LA NIMESULIDA Y ESTIMACIÓN DE LA TOXICIDAD DE SUS PRODUCTOS DE DEGRADACIÓN*** 179

III-197-O ***PROPIEDADES ELECTRÓNICAS RELACIONADAS CON LA ACTIVIDAD BIOLÓGICA DE DERIVADOS DE N-FENILMALEIMIDAS SUSTITUIDAS EN EL ANILLO AROMÁTICO MEDIANTE TÉCNICAS IN SILICO.*** 180

III-198-O ***DESCUBRIMIENTO DE NUEVOS ANTIMITÓTICOS INHIBIDORES DE TUBULINA MEDIANTE CRIBADO VIRTUAL BASADO EN FARMACÓFOROS*** 181

III-199-O ***EVALUACIÓN E IDENTIFICACIÓN DE NUEVOS INHIBIDORES DE LA PROTEÍNA MDM2 CON SU COMPLEJO P53 BASADO EN DOCKING MOLECULAR*** 182

III-228-O ***COMPRENDIENDO LA INTERACCIÓN ENTRE NANOPARTÍCULAS DE ORO FUNCIONALIZADAS CON DERIVADOS DE AMINOÁCIDOS Y PROTEÍNAS CON RESIDUOS CARGADOS POSITIVAMENTE.*** 183

III-232-O ***EFECTO DEL DOPADO DE ALUMINIO EN LA FORMACIÓN Y CRECIMIENTO DE NANOPARTÍCULAS DE TITANIA POR DINÁMICA MOLECULAR REACTIVA*** 184

III-278-O ***DESCUBRIENDO LA FUERZA OCULTA DE LA NANOCELULOSA*** 185

III-325-O ***ESTUDIO TEÓRICO Y ANÁLISIS TOPOLÓGICO DEL MECANISMO DE UNA CICLOADICIÓN TANDEM 1,3-DIPOLAR ALTAMENTE REGIOSELECTIVA PARA LA FORMACIÓN DE ISOXAZOLES ENTRE 1,1-DIÉSTERES DE CICLOPROPENO Y ÓXIDOS DE NITRILO*** 186

III-336-O ***EXPLORACIÓN DE PROCESOS DE TRANSFERENCIA DE CARGA EN FASE GASEOSA EN MALDI MS PARA EL ANÁLISIS DE PIGMENTOS FITOPLANCTÓNICOS*** 187

III-364-O ***ESTUDIO TEÓRICO Y ANÁLISIS TOPOLÓGICO DEL MECANISMO DE UNA CICLOADICIÓN TANDEM 1,3-DIPOLAR ALTAMENTE REGIOSELECTIVA PARA LA FORMACIÓN DE ISOXAZOLES ENTRE 1,1-DIÉSTERES DE CICLOPROPENO Y ÓXIDOS DE NITRILO.*** 188

III-365-O ***MODELADO TRIDIMENSIONAL DEL CANAL DE CA2+ ACTIVADO POR NUCLEÓTIDOS CÍCLICOS EN SOLANUM LYCOPERSICUM L.,. ESTUDIO TEÓRICO*** 189

III-404-O ***ESTUDIO COMPUTACIONAL INTEGRADO DEL MECANISMO DE LA PET HIDROLASA PARA LA BIODEGRADACIÓN DEL TEREFTALATO DE POLIETILENO (PET)*** 190

III-406-O ***AVENTURÁNDOSE EN NUEVOS TERRITORIOS DE MATRICES MALDI: UNA RED NEURONAL ARTIFICIAL PARA CARTOGRAFIAR EL COSMOS QUÍMICO*** 191

QUÍMICA VERDE Y SOSTENIBLE 192

VI-213-O ***REMEDIACIÓN ELECTROQUÍMICA DE METALES PESADOS EN AGUA UTILIZANDO SUPERFICIES DE ELECTRODOS DE CARBONO MODIFICADAS CON 1,10-FENANTROLINA*** 192

VI-214-O ***AVANCES EN LA DETECCIÓN Y REMEDIACIÓN DE CONTAMINANTES EMERGENTES EN AGUA MEDIANTE SENSORES ELECTROQUÍMICOS BASADOS EN GRAFENO INDUCIDO POR LÁSER*** 194

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VI-215-O ***DESARROLLO DE DISPERSIONES ACUOSAS DE POLIURETANO CON POTENCIAL APLICACIÓN EN LA INDUSTRIA DE TEXTILES RECUBIERTOS*** 196

VI-216-O ***APROVECHAMIENTO DE RESIDUOS DE CAÑA DE AZÚCAR POR CARBONIZACIÓN HIDROTERMAL: POTENCIAL USO DEL HIDROCARBÓN Y DEL SUBPRODUCTO LÍQUIDO*** 197

VI-217-O ***VALORIZACIÓN DE RESIDUOS AGROINDUSTRIALES MEDIANTE CARBONIZACIÓN HIDROTERMAL: UN CAMINO HACIA UNA ECONOMÍA CIRCULAR*** 198

VI-219-O ***SENSORES BASADOS EN GRAFENO INDUCIDO POR LÁSER PARA LA MEDICIÓN DE GASES DE EFECTO INVERNADERO (GEI)*** 199

VI-311-O ***DESARROLLO METODOLÓGICO PARA OBTENER UN MATERIAL DE REFERENCIA "IN-HOUSE" DE COCAÍNA PARA APLICACIONES FORENSES EN EL MARCO DE LOS ODS*** 200

VI-401-O ***HETEROGENIZACIÓN DE α−CIANOFENILENVINILENO EN NANOTUBOS DE TiO2 PARA LA FOTODEGRADACIÓN DE ÍNDIGO CARMÍN CON LUZ VISIBLE*** 201

VI-416-O ***VALORIZACIÓN DE GLICEROL ORGANOCATALIZADA POR CARBENOS N-HETEROCÍCLICOS (NHC)*** 202

PRESENTACIONES MODALIDAD POSTER 203

BIOQUÍMICA Y TECNOLOGÍA 204

VII-6-P DESARROLLO IMPLEMENTACIÓN Y ARQUITECTURA DE ANSEP 204

VII-7-P ***BIODEGRADACIÓN DE POLIURETANO MEDIANTE EL EXTRACTO ENZIMÁTICO DE ASPERGILLUS NIGER CMPUJ:H002 EN MEDIO SÓLIDO*** 205

VII-9-P ***APROXIMACIÓN METABOLÓMICA APLICADA AL EFECTO DEL ACEITE ESENCIAL DE LIPPIA ORIGANOIDES SOBRE LA FORMACIÓN DEL BIOFILM DE STAPHYLOCOCCUS AUREUS ATCC 43300.*** 206

VII-10-P ***EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DEL HONGO ENDÓFITO XYLARIA GUIANENSIS (XYLARIACEA)*** 207

VII-11-P ***APLICACIÓN DE METABOLÓMICA EN EL ESTUDIO DEL EFECTO DEL ACEITE ESENCIAL LIPPIA ORIGANOIDES SOBRE STAPHYLOCOCCUS AUREUS EN ESTADO PLANCTÓNICO*** 208

VII-12-P ***CARACTERIZACIÓN BIOQUÍMICA Y MORFOLÓGICA DE POBLACIONES DE PALMA DE IRACA (GÉNERO CARLUDOVICA) CULTIVADA EN DIFERENTES LOCALIDADES COLOMBIANAS*** 209

VII-13-P ***IDENTIFICACIÓN IN SILICO E IN VITRO DE SECUENCIAS DE ARNM CODIFICANTES PARA ENZIMAS DE LA FAMILIA CYP450 ASOCIADAS A LA PRODUCCIÓN DE TRITERPENOS PENTACÍCLICOS ÁCIDOS EN RAÍCES DE CECROPIA ANGUSTIFOLIA.*** 210

VII-14-P ***ANÁLISIS CINÉTICO DE LA PRODUCCIÓN DE TRITERPENOS PENTACÍCLICOS DE UN CULTIVO DE RAÍCES DE CECROPIA ANGUSTIFOLIA EN UN SISTEMA DE INMERSIÓN*** 211

VII-15-P ***ANÁLISIS METABOLÓMICO DEL EFECTO DEL ACEITE ESENCIAL DE LIPPIA ORIGANOIDES SOBRE LA INHIBICIÓN DE PSEUDOMONAS AERUGINOSA*** 212

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-247-P ***EVALUACIÓN DEL CONTENIDO DE FENOLES Y LA ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DE SOLANUM OCHRANTHUM (SOLANACEAE) DE LA ECORREGIÓN CAFETERA*** 213

VII-333-P ***SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE CÁLCULOS RENALES ARTIFICIALES, Y EL ESTUDIO DEL EFECTO DE EXTRACTOS DE PARIETARIA OFFICINALIS SOBRE SU FORMACIÓN Y SOLUBILIDAD*** 214

VII-363-P ***EVALUACIÓN IN SILICO DE LA INTERACCIÓN DEL CANAL DE POTASIO KV3.1 Y UNA TOXINA EXTRAÍDA DEL VENENO DEL ESCORPIÓN TITYUS MACROCHIRUS*** 215

VII-409-P ***ANÁLISIS GENÉTICO USANDO ISOELECTROENFOQUE (IEF) DE LA B- CASEÍNA EN GANADO DE RAZA HOLSTEIN DEL DEPARTAMENTO DE NARIÑO.*** 216

VII-415-P ***ESTUDIO IN SILICO DE INTERACCIÓN DE UNA TOXINA (TMA1) OBTENIDA DEL VENENO DEL ESCORPIÓN TITYUS MACROCHIRUS CON EL CANAL DE POTASIO KV3.1*** 217

VII-419-P ***DEGRADACIÓN DE POLIESTIRENO DE DENSIDAD MEDIA MEDIANTE EXTRACTOS ENZIMÁTICOS DE ASPERGILLUS NIGER CMPUJ:H002 UTILIZANDO CÁSCARAS DE YUCA COMO SUSTRATO*** 218

VII-429-P ***GENERACIÓN DE UNA BIBLIOTECA DE ADN CONTRA EL PÉPTIDO AB-40 HUMANO UTILIZANDO EL MÉTODO PROTEIN-SELEX.*** 219

VII-448-P ***ESTUDIO DEL POTENCIAL BIOSINTÉTICO DE HONGOS MACROMICETOS PARA LA PRODUCCIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE PLATA*** 220

ENERGÍAS RENOVABLES 221

X-16-P ***APROVECHAMIENTO DE RESIDUOS GENERADOS EN PROCESOS AGROINDUSTRIALES EN LA INDUSTRIA MEZCALERA*** 221

X-17-P ***SÍNTESIS DE FOTOCATALIZADORES A BASE DE TIO2/ÓXIDO DE GRAFENO (OXIDADO EN LOS BORDES) PARA LA PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO POR MÉTODO SOL-GEL*** 222

ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA 223

XII-20-P ***CARACTERIZACIÓN DE LA BIOACTIVIDAD DEL ACEITE ESENCIAL DE CARDAMOMO: UNA PERSPECTIVA PARA LA ENSEÑANZA DEL CONCEPTO ESTRÉS OXIDATIVO*** 223

XII-283-P ***ESTUDIO PRELIMINAR PARA LA SÍNTESIS EFICIENTE DE CHALCONA Y DIBENZALACETONA EN UNA PRÁCTICA DE LABORATORIO DE QUÍMICA ORGÁNICA*** 224

FISICOQUÍMICA 225

VIII-28-P ***PROPIEDADES FÍSICAS DE POLÍMEROS SUPRAMOLECULARES AMIGABLES CON EL AGUA DE CMC CON ISÓMEROS DE NITROFENILMALEIMIDAS*** 225

VIII-29-P ***ELECTROSÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE PELÍCULAS DE POLIPIRROL DOPADAS CON TETRAKIS(4-CARBOXIFENIL)PORFIRINA Y SU POTENCIAL USO COMO FOTOCÁTODO.*** 226

VIII-241-P ***PROPIEDADES FÍSICAS DE POLÍMEROS SUPRAMOLECULARES AMIGABLES CON EL AGUA DE CMC CON ISÓMEROS DE CARBOXIFENILMALEIMIDAS*** 227

VIII-397-P DISEÑO TEÓRICO DE UNA FORMA FARMACÉUTICA CON PERFIL DE LIBERACIÓN CONTROLADO. 228

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VIII-398-P ***DISEÑO TEÓRICO DE UNA FORMA FARMACÉUTICA CON PERFIL DE LIBERACIÓN CONTROLADO.*** 229

VIII-519-P ***EFECTO DE LOS RESORCINA[4]ARENOS SOBRE LA ACTIVIDAD ENZIMÁTICA DE LA CASA DE ASPERGILLUS SP. EN MEZCLA DE SOLVENTES.*** 230

PETROQUÍMICA Y GEOQUÍMICA 231

XVI-32-P ***CARACTERIZACIÓN FISICOQUÍMICA DE AGUAS SUPERFICIALES EN COLOMBIA ASOCIADAS A MUESTRAS DE SEDIMENTOS DE LLANURA DE INUNDACIÓN.*** 231

PRODUCTOS NATURALES 232

IX-41-P ***CARACTERIZACIÓN QUÍMICA DE LOS ÁCIDOS GRASOS Y ACTIVIDADES BACTERICIDA Y ANTIOXIDANTE DEL CALAMAR LOLLIGUNCULA BREVIS (BLAINVILLE, 1823)*** 232

IX-45-P ***CARACTERIZACIÓN FISICOQUÍMICA DEL FRUTO DE LA GROSELLA (PHYLLANTHUS ACIDUS) CULTIVADA EN EL SUROCCIDENTE DE COLOMBIA*** 233

IX-48-P ***EVALUACIÓN ANTIFÚNGICA DE PRODUCTOS SEMISINTÉTICOS DE PIPER CUMANENSE Y AVANCES EN LA MODIFICACIÓN POR REACCIONES MULTICOMPONENTES EN EL EXTRACTO ETANÓLICO*** 234

IX-49-P ***OPTIMIZACIÓN DE SÍNTESIS DEL LACTATO DE MENTILO BIOCATALIZADA POR NOVOZYM 435®*** 235

IX-50-P ***PERFIL FITOQUÍMICO Y ACTIVIDAD BIOLÓGICA DE EXTRACTOS DE DIFERENTE POLARIDAD DE LA CORTEZA DE RHIZOPHORA MANGLE EN DOS COMPLEJOS CENAGOSOS DEL CARIBE COLOMBIANO*** 236

IX-51-P ***ESTABLECIMIENTO DE UN SISTEMA PREPARATIVO PARA LA PURIFICACIÓN DE TRITERPENOS PENTACÍCLICOS ÁCIDOS OBTENIDOS DE CECROPIA SP.*** 237

IX-52-P ***DETERMINACIÓN DE LOS METABOLITOS SECUNDARIOS DE HOLOTHURIA ARENICOLA Y EVALUACIÓN DE SU ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE Y ANTIMICROBIANA*** 238

IX-54-P ***ACTIVIDAD ACARICIDA DE SUSTANCIAS PROVENIENTES DE ACEITES ESENCIALES PARA EL CONTROL DE LA GARRAPATA RHIPICEPHALUS MICROPLUS*** 239

IX-55-P ***SEMI-SÍNTESIS, PURIFICACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE BETAXANTINAS, A PARTIR DE EXTRACTOS DEL FRUTO OPUNTIA DILLENII Y EVALUACIÓN DE SU CAPACIDAD ANTIRADICAL*** 240

IX-56-P ***EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA DE EXTRACTOS METANÓLICOS DE CARLUDOVICA PALMATA*** 241

IX-57-P ***COMPOSICIÓN QUÍMICA, EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA FRENTE HELICOBACTER PYLORI Y CITOTÓXICA DE EXTRACTOS DE SUBPRODUCTOS AGROINDUSTRIALES DE ESPECIES DEL GÉNERO PASSIFLORA*** 242

IX-244-P ***COMPARACIÓN DE EXTRACCIÓN UTILIZANDO SOLVENTES EUTÉCTICOS NATURALES EN MORINGA OLEIFERA*** 244

IX-294-P ***REVISIÓN DE CONDICIONES DE EXTRACCIÓN Y CUANTIFICACIÓN DE PSILOCIBINA Y PSILOCINA EN MUESTRAS DE HONGOS ALUCINÓGENOS TRAFICADOS EN BOGOTÁ*** 245

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-295-P ***Estudio de Identificación Química de Mitragyna Speciosa "Kratom" Detectado en un Producto Comercial para Consumo Humano en Colombia*** 246

IX-307-P ***Comparación De Carotenoides Presentes En La Pulpa De Accesiones De Passiflora edulis f. flavicarpa Por HPLC-MS y GC-MS*** 247

IX-331-P ***Acoplamiento Molecular de Dos Compuestos Coprinol y Radianspene M de Coprinellus Radians con la Enzima 6JU4*** 248

IX-338-P ***Síntesis Y Efectividad Antirradicalaria contra DPPH y Antifúngica contra C.lindemuthianum De (E)-2-(Benzotiazol-2-il)-3-arilacrilonitrilos*** 249

IX-354-P ***Validación de un Método de Análisis de Terpenoides por HS-GC-MS en Inflorescencias de Cannabis sativa Cultivadas en Colombia*** 250

IX-355-P ***Estudio del efecto de la tautomería cetoenólica en la cuantificación de curcuminoides presentes en productos naturales por HPLC-DAD*** 251

IX-358-P ***Análisis Espectroscópico de los Extractos Naturales de la planta Justicia secunda y Evaluación in Sílico de los Compuestos Frente a SARS-CoV-II*** 253

IX-396-P ***Perfil metabólico y espectros IR de plantas de Croton Gosypifollius obtenidas en invernadero*** 254

IX-408-P ***Actividad antimicrobiana de aceites esenciales frente a fitopatógenos prevalentes en agricultura.*** 255

IX-435-P ***Identificación de Compuestos Orgánicos Volátiles de Frutales Amazónicos (Canangucha, Camu-Camu y Uva Caimarona) Mediante SPME-HS-GC-MS*** 256

IX-436-P ***Metabolitos especializados de Meriania tomentosa, M. longifolia, M. macrophila, M. quintuplinervis en extracto en CH2Cl2 mediante GC-MS*** 257

IX-439-P ***Uso de extractos etanólicos de Croton y su potencial uso como inhibidores de corrosión en acero al carbón en medio ácido*** 258

QUÍMICA AMBIENTAL 259

XIII-62-P ***Estudio Fisicoquímico de la degradación de la Concha de Papa (Peridermis del Solanum Tuberosum) por medio de una Autoclave Anaerobia a Escala de Laboratorio*** 259

XIII-63-P ***Remoción de Antibióticos Comerciales por Composites Obtenidos a Partir de Residuos de poliestireno y bentonita*** 260

XIII-64-P ***Gases Endógenos del Territorio Colombiano y Clima Terrestre: Comparativo de Flujos Anuales*** 261

XIII-66-P ***Remoción de Cd2+ Presente en Agua Mediante el Uso de Bioadorbentes Sintetizados a Partir de Cascarilla de Arroz y Delftia lacustris*** 262

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-67-P ***Reducción De Contaminantes En Aguas Por Medio De Radiación UV Artificial Implementando Fotocatálisis (Fase 3)*** 263

XIII-70-P ***Análisis por Espectroscopia UV-VIS de la Descomposición de Hojarasca de Theobroma grandiflorum en la Amazonia Colombiana*** 264

XIII-71-P ***Evaluación De Un Sistema De Nanopartículas Metálicas Zno Y Bimetálicas Zno/Ag En El Proceso De Fotodegradación De Rodamina B.*** 265

XIII-72-P ***Tratamiento de Agua Residual Industrial de Origen Textil, Empleando Lodos Activados*** 267

XIII-73-P ***Síntesis de catalizadores metal-carbenos N-heterocíclicos (NHC) y evaluación de su actividad catalítica en condiciones ambientalmente sostenibles*** 268

XIII-74-P ***Desarrollo de un Sistema de Nanopartículas Metálicas encapsuladas en Quitosano para la Fotodegradación de Azul de Metileno*** 269

XIII-75-P ***Obtención de un Material Adsorbente a partir de Biomasa Forestal Caucana y su Empleo en la Remoción de Plaguicidas*** 271

XIII-76-P ***Materiales Basados en Celulosa para la Remoción de Metilparabeno Mediante Procesos de Adsorción*** 272

XIII-78-P ***Fotofiltro de carbón activado C@TiO2 para la reducción de contaminantes en fuentes de agua. Estudio Preliminar con Nitratos*** 273

XIII-242-P ***Análisis de las Emisiones de Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos que Afectan la Calidad del Aire en la Ciudad de Manizales, por Medio de una Tecnología de Aviones no Tripulados Acoplados a SPME*** 275

XIII-263-P ***Evaluación de un Carbón Activado Obtenido a partir del Cuesco de Palma de Aceite para ser Usado en Procesos de Electro-Oxidación en la Degradación de Tolueno*** 276

XIII-271-P ***Niveles de Trihalometanos y Ácidos Haloacéticos en Aguas de Piscinas y su Asociación con Parámetros de Calidad del Agua*** 277

XIII-277-P ***Remoción de Fosfato en Solución Acuosa Empleando Solidos Derivados del Sistema Hidrotalcita-Carbón Activado*** 278

XIII-280-P Optimización de la Degradación Fenton Heterogéneo Fotoasistido de Contaminantes Emergentes en Aguas Residuales Domésticas Activada por Nitruro de Carbono Grafítico Dopado con Fe (Fe-g-C3N4) 279

XIII-293-P ***Evaluación Preliminar de Compuestos Orgánicos Volátiles Tolueno, Etil benceno y Xileno (TEX), mediante un Muestreo Pasivo en el Municipio de Popayán.*** 281

XIII-334-P ***Comparación De Adsorbentes De Cáscara De Plátano (Musa Paradisiaca) Verde Y Madura En La Remoción De Metales Pesados Cd y Pb En Agua Contaminada*** 282

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-348-P ***IMPACTO AMBIENTAL POR TOXICIDAD DE CROMO EN AGUA DE RIEGO PROVENIENTE DEL RIO TUNJUELO BOGOTÁ D.C*** 283

XIII-384-P ***CONTAMINACIÓN POR MERCURIO EN COLOMBIA: UNA VISIÓN GENERAL*** 284

XIII-454-P ***ESTUDIO PRELIMINAR DE LA OXIDACIÓN CATALÍTICA HOMOGÉNEA DE UN COLORANTE AZOICO CON EL SISTEMA Co2+/PERSULFATO*** 285

XIII-459-P ***ANÁLISIS DE LA VELOCIDAD DE DIFUSIÓN DE NH4Cl ENCAPSULADO EN Ca5(PO4)3(OH) OBTENIDO DE PECES DE TILAPIA ROJA (OREOCHROMIS SPP.) Y ALGINATO DE SODIO OBTENIDO DE SARGASSUM VULGARE*** 286

XIII-482-P ***EFECTO DE CARBONATO, SULFATO, FOSFATO Y HIERRO (II) EN LA DEGRADACIÓN FOTO-OXIDATIVA DE FLUCONAZOL*** 288

XIII-506-P ***REMOCIÓN DE LOSARTÁN EN AGUAS DE RIEGO REALES DE LA SABANA DE BOGOTÁ MEDIANTE UN SISTEMA DE ELECTROCOAGULACIÓN (Al-Al) COMBINADO CON UN SISTEMA DE OXIDACIÓN AVANZADA, EQUIPADO CON UN ÁNODO DE DIAMANTE DOPADO CON BORO Y GRAFITO.*** 289

QUÍMICA ANALÍTICA 291

IV-80-P ***DESARROLLO DE UN MATERIAL DE REFERENCIA "IN HOUSE" DE DELTA-9-TETRAHIDROCANNABINOL (THC) CON FINES FORENSES*** 291

IV-86-P ***CARACTERIZACIÓN SENSORIAL DEL COLD BREW MEDIANTE SPE-P&T-GC-O*** 292

IV-87-P ***DETERMINACIÓN DE SELECTIVIDAD DE RESINAS DE INTERCAMBIO IÓNICO PARA DETERMINACIÓN DE CONTAMINANTES EN AGUA LLUVIA.*** 293

IV-88-P ***DETERMINACIÓN DE OCRATOXINA A (OTA) EN CACAO (THEOBROMA CACAO L.) Y CAFÉ (COFFEA ARABICA) POR MEDIO DE CROMATOGRAFÍA LÍQUIDA DE ALTA EFICIENCIA (HPLC)*** 294

IV-89-P ***VERIFICACIÓN DEL MÉTODO ANALÍTICO PARA LA DETERMINACIÓN DE MERCURIO TOTAL EN CARBONES Y CENIZAS DE CARBÓN POR COMBUSTIÓN DIRECTA*** 296

IV-90-P ***IDENTIFICACIÓN DE LOS COMPUESTOS SENSORIALMENTE ACTIVOS EN EL AROMA DEL COLD BREW POR MEDIO DE HS-SPME-GC-O-MS*** 297

IV-91-P ***USO DE INMUNOENSAYOS DE FLUJO LATERAL PARA LA DETERMINACIÓN DE PLAGUICIDAS EN SISTEMAS ACUÁTICOS CONTINENTALES*** 298

IV-92-P ***DESARROLLO DE UN MÉTODO DE CROMATOGRAFÍA LÍQUIDA DE ALTA EFICIENCIA PARA LA SEPARACIÓN Y CUANTIFICACIÓN DE DIOSGENINA EN UN EXTRACTO DEL FRUTO IGUARAYA DE LA PLANTA CARDÓN GUAJIRO (STENOCEREUS GRISEUS)*** 300

IV-93-P ***MODIFICACIÓN DE UNA SUPERFICIE POLIMÉRICA CON RESORCINARENOS PARA LA PRECONCENTRACIÓN DE CARNITINA*** 302

IV-224-P ***EXTRACCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE ÁCIDOS GRASOS LIBRES DE LODOS DE DESECHOS DE LA INDUSTRIA DE ACEITE DE PALMA Y SU POSTERIOR MODIFICACIÓN Y EVALUACIÓN COMO UN TENSOACTIVO*** 303

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-227-P ***DETERMINACIÓN DE AZUFRE MEDIANTE CALIBRACIÓN NO CONVENCIONAL "MULTI-ENERGY" EN MUESTRAS DE ORIGEN FOLIAR POR FORMACIÓN DE LA MOLÉCULA DIATÓMICA SN-S HACIENDO USO DE LA TÉCNICA DE ESPECTROSCOPÍA DE ABSORCIÓN ATÓMICA DE FUENTE CONTINUA Y ALTA RESOLUCIÓN (HR-CS-AAS)*** 304

IV-237-P ***DISEÑO EXPERIMENTAL PLACKETT-BURMAN: OPTIMIZACIÓN DEL PRETRATAMIENTO DE CÁNNABIS PARA LA CUANTIFICACIÓN DE METALES POR ICP-MASAS*** 305

IV-245-P ***PRODUCCIÓN DE UN MATERIAL DE REFERENCIA DE ANIONES Y CATIONES DISPONIBLES EN SUELOS*** .. 306

IV-246-P ***EVALUACIÓN DE EQUIVALENCIAS ENTRE TÉCNICAS ANALÍTICAS PARA LA MEDICIÓN DE ANIONES Y CATIONES DISPONIBLES EN SUELOS*** 307

IV-273-P ***ESTIMACIÓN DE INCERTIDUMBRE EN EL ÁNALISIS DE CADMIO EN AGUA POR HORNO DE GRAFFITO-ABSORCIÓN ATÓMICA CON CALIBRACIÓN NO-LINEAL*** 308

IV-297-P ***CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL DEL EXTRACTO ALCOHÓLICO DEL ASAÍ LIOFILIZADO COLOMBIANO.*** 309

IV-298-P ***ESTUDIO DE LOS COMPUESTOS VOLÁTILES FLORALES DE LAS ESPECIES ANTHURIUM CARAMANTAE ENGL Y STENOSPERMATION WEBERBAUERI ENGL (ARACEAE) MEDIANTE UNA APROXIMACIÓN METABOLÓMICA*** 310

IV-304-P ***USO DE ÁCIDO ASCÓRBICO COMO MODIFICADOR DE MATRIZ PARA LA DETERMINACIÓN DE VANADIO EN SUELOS MEDIANTE SLURRY SAMPLING HACIENDO USO DE LA TÉCNICA DE ESPECTROSCOPÍA DE ABSORCIÓN ATÓMICA DE FUENTE CONTINUA Y ALTA RESOLUCIÓN (HR-CS-AAS)*** 311

IV-312-P ***COMPARACIÓN DE MÉTODOS PARA DETERMINAR CARBONO ORGÁNICO EN EL SUELO*** 312

IV-324-P ***IMPLEMENTACIÓN DE UNA METODOLOGÍA ANALÍTICA PARA CUANTIFICACIÓN DE ELEMENTOS POTENCIALMENTE PELIGROSOS (EPPS), PRESENTES EN MATRICES MEDIO AMBIENTALES, MEDIANTE EXTRACCIÓN CON MICROONDAS POR ICP-MS*** 313

IV-326-P ***ELEMENTOS POTENCIALMENTE PELIGROSOS EN COLOMBIA: ESPECIACIÓN DE ARSÉNICO EMPLEANDO HPLC-ICP-MS*** 314

IV-357-P ***DETERMINACIÓN DEL PERFIL MOLECULAR DE STAPHYLOCOCCUS AUREUS EN ESTADO BIOFILM EMPLEANDO MS-MALDI-TOF*** 315

IV-360-P ***ESTUDIO Y ANÁLISIS DE ASPARAGINA MEDIANTE ELECTROFORESIS CAPILAR CE-DAD EN MUESTRAS DE PANELA*** 316

IV-362-P ***DETERMINACIÓN DE FÓSFORO DISPONIBLE EN LOS SUELOS DE LA ALTILLANURA COLOMBIANA POR EL MÉTODO DE RESINA DE INTERCAMBIO IÓNICO.*** 318

IV-369-P ***RUTAS PARA EL DISEÑO RACIONAL DE SENSORES ELECTROQUÍMICOS BASADOS EN IMPRESIÓN MOLECULAR CON POLIPIRROL*** 319

IV-373-P ***DETERMINACIÓN DE TIOMERSAL EN VACUNAS POR CV-AAS UTILIZANDO NANOPARTÍCULAS HÍBRIDAS DE PUNTOS CUÁNTICOS DE GRAFENO-TIO2 COMO AGENTES FOTOCATALÍTICOS*** 320

IV-375-P ***SÍNTESIS DE SOLVENTES EUTÉCTICOS PROFUNDOS PARA SU UTILIZACIÓN COMO EXTRACTANTES.*** 321

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-387-P ***Estudio de la Variabilidad Isotópica del Oro Proveniente del Distrito Minero Puerto Berrío-Puerto Nare, Departamento de Antioquia, Mediante la Técnica de Espectrometría de Masas con Plasma de Acoplamiento Inductivo (ICP-MS)*** 322

IV-388-P ***Comparación de Métodos UHPLC para la Cuantificación de Tocoferoles y Tocotrienoles en Aceites y Grasas de Origen Amazónico*** 323

IV-412-P ***Caracterización de Partículas de Oro de los Municipios de Santo Domingo – San Roque (Antioquia) por Espectrometría de Microfluorescencia de rayos X*** 324

IV-456-P ***Implementación de la Técnica HS-SPME-GC-MS para el Análisis de Compuestos Orgánicos Presentes en Aliento*** 325

IV-476-P ***Síntesis de Membranas Poliméricas de Inclusión Empleando un Ligando Derivado de Terpiridina para el Estudio de la Remoción de Cobre, Zinc y Mercurio en Medios Acuosos*** 327

QUÍMICA DE ALIMENTOS Y AGROINDUSTRIA 329

XIV-95-P ***Identificación de Plaguicidas en el Fruto en s Piñas Recolectadas en la Ciudad de Santiago de Cali, por Cromatografía Gaseosa y Cromatografía Líquida de Alta Resolución Acopladas a Espectrometría de Masas*** 329

XIV-96-P ***Evaluación de Marcadores Fitoquímicos Asociados con Parámetros Fisicoquímicos para Identificar Genotipos de Ají con Alto Potencial Comercial*** 330

XIV-101-P ***Monitoreo de Parámetros Fisicoquímicos y Microbiológicos en la Fermentación de Cafés Especiales Producidos en Nariño Colombia y Correlación de Estos Parámetros con la Calidad Sensorial del Café*** 331

XIV-103-P ***Extracción De Inulina De La Cidra Sechium Edule Var. Albus Levis Por La Técnica De Ultrasonido*** 332

XIV-104-P ***Evaluación Metabolómica Durante la Fermentación de Diferentes Mezclas de Theobroma cacao provenientes del Departamento de Arauca*** 333

XIV-105-P ***Caracterización Fisicoquímica de la Bebida Fermentada Prebiótica a Partir de Eugenia myrtifolia*** 334

XIV-106-P ***Comparación Fitoquímica de Extractos de Cidra (Sechium edule Jacq./Sw. Va. Virens levis) Obtenidos por Diferentes Técnicas de Extracción.*** 335

XIV-107-P ***Análisis de Carotenoides y Clorofilas en Hojas de Agraz (Vaccinium meridionale) por Cromatografía Líquida de Ultra Alta Eficiencia en Fase Reversa con Detector de Arreglo de Diodos (RP-UHPLC-DAD)*** 336

XIV-108-P ***Efecto de la presión transmembranal sobre la composición y propiedades del retenido*** *de* ***microfiltración tangencial de leche bovina.*** 337

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-109-P ***Caracterización de las Propiedades Fisicoquímicas y Mecánicas de Fibras Lignocelulósicas de Palma de Iraca (Carludovica palmata) con Potencial uso en la Producción de Papel Artesanal.*** 338

XIV-110-P ***Caracterización de Parámetros Fisicoquímicos, Mecánicos y Biométricos de Fibra de Palma de Iraca Obtenida de Cuatro Materiales Vegetales del Género Carludovica*** 339

XIV-111-P ***Caracterización Fisicoquímica de Harina Alternativa de Noni (Morinda citrifolia L.)*** 340

XIV-113-P ***Estrategias de Microencapsulación para la Preservación y Control de la Calidad del Esperma en la Especie Bovina*** 342

XIV-114-P ***Optimización nanotecnológica para potenciar la actividad antibacteriana del citral frente a los agentes infecciosos responsables de la mastitis bovina subclínica*** 343

XIV-229-P ***Caracterización Fisicoquímica del Almidón de Bore Cultivado en el Departamento del Quindío*** 344

XIV-260-P ***Influencia del pH en la obtención del jarabe de mucílago de cacao.*** 345

XIV-261-P ***Edulcorantes Líquidos a partir de Exudado de Mucílago de Cacao por Evaporación*** 346

XIV-274-P ***Búsqueda Racional de Compuestos Volátiles de Origen Natural como Posibles Agentes de Reemplazo al Clorpirifos*** 347

XIV-286-P ***Caracterización Química de Dos Especies Amazónicas Umari (Poraqueiba sericea Tul) y Uva Caimarona (Pourouma cecropiifolia) Como Productos de Interés Económico en la Amazonía Colombina*** 348

XIV-287-P ***Evaluación de las Características Tecno-funcionales de Harinas de Dos Variedades de Chontaduro (Bactris gasipae)*** 349

XIV-290-P ***Cinética de Inactivación de Pectinmetilesterasa en Frutos de mora (Rubus glaucus)*** 350

XIV-314-P ***Interacciones Moleculares Clave para la Actividad Agonista y Antagonista del Receptor de Octopamina de la D. melanogaster*** 351

XIV-329-P ***Caracterización Preliminar Del Aceite De Coco Virgen (Híbrido De Las Variedades Alto Caribe Y Enano Malayo) En Córdoba.*** 352

XIV-353-P ***Diseño del Muestreo y Caracterización Fisicoquímica para la Determinación de Compuestos Xenobióticos en Piña (Ananás Comosus (L.) Merr) Comercializadas en la Ciudad de Santiago de Cali*** 354

XIV-361-P ***Principales Nematodos Fitoparásitos Presentes en Cultivos de Soya y Maíz de la Altillanura Colombiana*** 355

XIV-386-P ***Efecto de la Fermentación y las Técnicas de Extracción en las Propiedades y Composición de Grasas de Copoazú (Teobroma grandiflorum) Como Ingrediente en la Industria Cosmética.*** 356

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-399-P ***ANÁLISIS VOLATILÓMICO EN AGUACATE HASS (PERSEA AMERICANA MILL) PARA LA IDENTIFICACIÓN DE POTENCIALES BIOMARCADORES DE TOXICIDAD*** 357

XIV-455-P ***DETERMINACIÓN DE COMPUESTOS XENOBIÓTICOS Y POSIBLES PRODUCTOS DE METABOLIZACIÓN EN PIÑAS COMERCIALIZADAS EN LA CIUDAD DE SANTIAGO DE CALI*** 358

XIV-471-P ***COMPARACIÓN DE DOS MÉTODOS PARA LA EXTRACCIÓN DE PECTINA A PARTIR DE LA CÁSCARA DE LULO (SOLANUM QUITOENSE) CONTRIBUCIÓN TITULO QUÍMICA*** 359

XIV-473-P ***ESTUDIO DE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA DE SACHA INCHI CULTIVADA EN EL DEPARTAMENTO DEL CAUCA*** 360

XIV-480-P ***CARACTERIZACIÓN FISICOQUÍMICA Y ESTRUCTURAL DE GALLETAS ADICIONADAS CON PREBIÓTICOS ELABORADAS A BASE DE HARINA DE PULPA DE CAFÉ*** 361

XIV-481-P ***CARACTERÍSTICAS FISICOQUÍMICAS Y ESTRUCTURALES DE HARINA DE PULPA DE CAFÉ (COFFEA ARABICA)*** 363

XIV-491-P ***ELABORACIÓN DE UNA MAYONESA REDUCIDA EN GRASA EMPLEANDO ACEITE DE SEJE (OENOCARPUS BATUA) Y ALMIDÓN WAXY DE YUCA (MANIHOT ESCULENTA)*** 365

XIV-501-P ***EVALUACIÓN DE PROPIEDADES ANTIOXIDANTES Y ANTIBACTERIALES DE EXTRACTOS ACUOSOS A BASE DE UNA MEZCLA DE RESIDUOS DE PIÑA (ANANAS COMOSUS) MD2 "ORO MIEL"*** 366

QUÍMICA DE MATERIALES 367

V-115-P ***EVALUACIÓN DE LAS PROPIEDADES ÓPTICAS DE PUNTOS CUÁNTICOS DE GRAFENO PARA APLICACIÓN EN PROCESOS FOTODINÁMICOS*** 367

V-116-P ***DEVELOPMENT OF YBA2CU3O7-BA2YTAO6 NANOCOMPOSITES BY CHEMICAL SOLUTION DEPOSITION*** 368

V-121-P ***ACTIVIDAD ANTICANCERÍGENA DE ÓXIDO DE GRAFENO CONTRA OSTEOSARCOMA Y SU BIOCOMPATIBILIDAD IN VITRO E IN VIVO*** 369

V-125-P ***ELABORACIÓN DE PELÍCULAS DELGADAS DE PARTÍCULAS DE TIO2 Y N-TIO2 PARA SU INCORPORACIÓN EN CELDAS SOLARES SENSIBILIZADAS POR PIGMENTOS*** 371

V-126-P ***CARACTERIZACIÓN Y EVALUACIÓN DE DESEMPEÑO DE RESIDUO SIDERÚRGICO COMO CATALIZADOR EN EL PROCESO DE OZONIZACIÓN PARA LA REMOCIÓN DE FÁRMACOS EN CUERPOS DE AGUA.*** 372

V-127-P ***POLI(CLORURO DE VINILO) MODIFICADO PARA SÍNTESIS DE POLÍMEROS FUNCIONALES POTENCIALMENTE APLICABLES AL TRATAMIENTO DE AGUAS*** 373

V-128-P ***DETERMINACIÓN DE XANTINAS A PARTIR DE UN ELECTRODO DE PASTA DE CARBONO MODIFICADO CON BENTONITA/CISTEÍNA*** 374

V-226-P ***SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE PUNTOS CUÁNTICOS Y SU ESTABILIZACIÓN EN PARTÍCULAS DE ALMIDÓN*** 375

V-233-P ***NANOPARTÍCULAS BIMETÁLICAS DE COBRE Y HIERRO SOPORTADAS EN FIBRAS DE FIQUE COMO CATALIZADOR EN LA DEGRADACIÓN DE COLORANTES DE LA INDUSTRIA TEXTIL*** 376

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-238-P ***SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE PEROVSKITAS DE LATI1-XMNXO3 (X=0-1)*** 377

V-243-P ***SÍNTESIS Y ESTUDIO DE LA BIODEGRADABILIDAD DE BIOPOLÍMEROS ELABORADOS A PARTIR DE ALMIDÓN DE PAPA Y FIBRA OBTENIDA DE LA CORTEZA DEL PECIOLO DE LA PALMA DE IRACA (CARLUDOVICA PALMATA).*** 378

V-251-P ***EVALUACIÓN DE ELECTRODOS DE CARBÓN ACTIVADO DE CUESCO DE PALMA ACEITERA PARA LA DEGRADACIÓN DE AZUL DE METILENO DISUELTO EN AGUA IMPLEMENTANDO EL PROCESO DE ELECTRO-FENTON.*** 380

V-256-P ***PUNTOS CUÁNTICOS DE CARBONO ¿UN ENREJADO POLIAROMÁTICO?: REALIDADES SOBRE SU ESTRUCTURA Y MÉTODOS DE PURIFICACIÓN*** 381

V-269-P ***INMOVILIZACIÓN DE PEROXIDASA DE PANICUM MAXIMUM SOBRE CARBÓN ACTIVADO PARA LA DEGRADACIÓN DE ÍNDIGO CARMÍN*** 383

V-299-P ***SÍNTESIS DE ELECTROCATALIZADORES BASADOS EN OXIHIDRÓXIDOS DE FE/NI SOBRE ESPUMAS DE NÍQUEL PARA LA ELECTRÓLISIS DEL AGUA EN MEDIO ALCALINO*** 384

V-341-P ***TRANSFORMACIÓN DE CARBÓN TÉRMICO COLOMBIANO EN ESTRUCTURAS FULLERÉNICAS MULTICAPAS PARA EL DESARROLLO DE SUPERCAPACITORES*** 385

V-347-P ***SÍNTESIS DE FOTOCATALIZADORES COMPUESTOS DE TIO2 Y MATERIALES GRAFÉNICOS*** 386

V-350-P ***DISEÑO RACIONAL DE NANOSISTEMAS DE LIBERACIÓN SIMULTÁNEA Y CONTROLADA DE FÁRMACOS Y CURCUMINA ENFOCADOS EN EL TRATAMIENTO DE CÁNCER DE SENO*** 387

V-376-P ***ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES ÓPTICAS, ELÉCTRICAS Y MAGNÉTICAS DEL SISTEMA (1-X) YBA2CU3O7-Δ – (X) BATIO3*** 388

V-418-P ***EFECTO DEL DOPAJE QUÍMICO CON NANOPARTÍCULAS DE TIO2 EN LAS PROPIEDADES ÓPTICAS, ELÉCTRICAS Y MAGNÉTICAS DEL YBA2CU3O7- Δ*** 389

V-421-P ***SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE BIONANOCOMPOSITOS DE OXIDO DE COBRE Y FIBRAS DE FIQUE PARA EL TRATAMIENTO DE AGUAS CONTAMINADAS CON COLORANTES.*** 390

V-422-P ***SÍNTESIS DE NANOMATERIALES POROSOS "METAL-ORGANIC-FRAMEWORKS" CON POTENCIAL APLICACIÓN EN LA ENTREGA DE FÁRMACOS*** 391

V-443-P ***SÍNTESIS ELECTROQUÍMICA DE PELÍCULAS DE POLI(3,4-ETILENDIOXITIOFENO)-POLI(ESTIRENOSULFONATO) DOPADO CON BROMURO DE TETRAETIL AMONIO Y EVALUACIÓN DE PROPIEDADES COMO MATERIAL TRANSPORTADOR DE HUECOS*** 392

V-444-P ***PREPARACIÓN DE CARBÓN ACTIVADO A PARTIR DE LODO DE POTABILIZACIÓN Y SU EVALUACIÓN EN LA ADSORCIÓN DE ANIONES INORGÁNICOS PARA MEJORAR LA EFICIENCIA DE POAS*** 393

V-450-P ***SÍNTESIS Y EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD CATALÍTICA DE NANOPARTÍCULAS DE MAGNETITA, MODIFICADAS CON JUGO DE PSEUDOTALLO DE PLÁTANO Y PALADIO (II) EN LA REDUCCIÓN DE 4-NITROFENOL*** 394

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-470-P ***Síntesis, Caracterización Electroquímica y Propiedades de Almacenamiento de Carga en Películas de Polindol Depositadas sobre Sustratos de Oro*** 395

V-472-P ***Síntesis de Películas Biopolimericas a Partir de un Subproducto Industrial*** 396

V-483-P ***Estudio de Películas de Titanio-Plata en diferentes configuraciones para Aplicaciones Protectoras en Dispositivos Biomédicos*** 397

V-496-P ***Síntesis de un Nanofluido Magnético de Óxido de Grafeno y su Efecto Sobre las Propiedades Interfaciales Roca-Fluido en la Recuperación Mejorada de Petróleo*** 398

QUÍMICA INDUSTRIAL, TECNOLOGÍA E INNOVACIÓN 399

XI-131-P ***Nanodispersiones acuosas para su uso como pigmentos cerámicos*** 399

XI-305-P ***Cuantificación de los aminoácidos L-prolina y trans – 4 – Hidroxy – L – prolinas presentes en matrices colagénicas para evaluar la correlación de estas variables en el proceso de producción de gelatina HS.*** 400

XI-371-P ***Regulación y Riesgos Asociados a los Nanomateriales: Aplicación y Contexto Colombiano*** 401

QUÍMICA INORGÁNICA 402

II-135-P ***Implementación de la Metodología de Digestión para Análisis por ICP-MS en el Estudio de Lantánidos, Itrio y Escandio Presentes en Cenizas de Carbón*** 402

II-137-P ***Uso Potencial del Ácido Silicotúngstico como Catalizador en la Obtención de Biodiesel a partir del Aceite de Aguacate Persea americana Mill Variedad Lorena.*** 403

II-138-P ***Obtención de Biodiesel a partir del Aceite de Aguacate Persea americana Mill. Variedad Lorena empleando Ácido Fosfotúngstico como catalizador*** 404

II-139-P ***Síntesis y Caracterización de Compuestos de Coordinación de Cu y Sn Derivados de los Isómeros meta y para de (N,N-dibencilbencenodiamin)-ditiocarbamato*** 405

II-140-P ***Síntesis, Caracterización y Análisis Estructural de Dos Complejos de Coordinación Derivados de Biguanida*** 406

II-141-P ***Síntesis, Caracterización y Análisis Estructural de Complejos de Metformina: Simulación de Acoplamiento y Dinámica Molecular para Potencial Uso como Agentes Antidiabéticos.*** 408

II-142-P ***Síntesis solvotermal, caracterización y estudio estructural de 3 MOFs basados en el ácido trimésico y Ni2+.*** 409

II-413-P ***Síntesis y Caracterización de Complejos de Dibromo-dioxo-molibdeno(VI) con Ligandos Bidentados 2,2'-Bipiridina Y 1,10-Fenantrolina*** 410

II-428-P ***Síntesis química y caracterización de nanobarras de plata con diversos agentes protectores y sus propiedades antimicrobianas contra bacterias gram positivo y negativo*** 411

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

II-438-P ***Síntesis y Potencial Actividad Antimicrobiana de Complejos Asimétricos de Cu(II) Derivados de Ligandos con Grupos Pirazol y Bases de Schiff.*** 412

II-489-P ***Síntesis y Caracterización de un Quimiosensor Multiparametrico Selectivo Para Metales Pesados en Medio Acuoso.*** 414

II-493-P ***Síntesis de complejos de Rutenio(II) con ligantes NHpirazólicos: Reacciones de alquilación en fase homogénea de metilcetonas*** 415

II-513-P ***Compuestos fluorados Rh (I) –NHC como posibles antibacterianos contra*** **Klebsiella pneumoniae** ***multiresistente y productoras de BLEE*** 416

II-514-P ***Aplicación en Catálisis Asimétrica de Complejos Metálicos con Ligandos Base Schiff*** 417

II-522-P ***Carbocatálisis asistida por ultrasonido en materiales carbonosos modificados con hierro y manganeso*** 418

QUÍMICA MEDICINAL 419

XV-153-P ***Sintesis y Ensayos Preliminares de la Actividad Antibacteriana de una Base de Schiff tipo Tiosemicarbazona*** 419

XV-154-P ***Efectividad de Moléculas tipo Estirilquinolinas en Modelo Animal Frente a la Enfermedad de Chagas: Una Alternativa para el Desarrollo Nuevos Medicamentos*** 420

XV-155-P ***Perfil Neurofarmacológico de Nuevos Compuestos Tiazepínicos y Tiazolidínicos Seleccionados Mediante Cribado Virtual*** 421

XV-156-P ***Evaluación de la Actividad Citotóxica in vitro de Análogos Quinolínicos Sintéticos*** 422

XV-157-P ***Síntesis de nanopartículas multifuncionales con potencial para el transporte y liberación controlada de medicinas anticancerígenas*** 423

XV-383-P ***Fracciones derivadas de Scutellaria incarnata disminuyen la viabilidad celular de las líneas celulares tumorales K563 y U937.*** 424

XV-392-P ***Análisis de Relación Estructura-Actividad Asistida por Isómeros Posicionales de Fenilfenalenona (PISPA-SAR) como Herramienta para la identificación de compuestos "HIT" en Química Medicinal.*** 425

QUÍMICA ORGÁNICA 426

I-159-P ***Isomerización de 7-Aril-3-formilpirazolo[1,5-a]pirimidinas a 5-Aroil-NH-pirazolo[3,4-b]piridinas vía Apertura y Cierre de Anillo en Medio Básico*** 426

I-160-P ***Síntesis de Nuevos Quimiosensores de Aniones Basados en Moléculas Híbridas de Cumarina–Pirazolo[1,5-a]pirimidina–Hemicianina*** 427

I-162-P ***Síntesis y evaluación de la actividad antitumoral de 3-hidroxi-2,3-dihidrobenzo[b]furanos y benzo[b]furanos}*** 428

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-168-P ***La 4-estirilquinolina como bloque de construcción de nuevos híbridos moleculares del tipo estirilquinolina-quinazolinona*** 430

I-169-P ***Diseño y síntesis de un ligando fotoactivo con quiralidad axial Basado en el núcleo de Fenalenona*** 432

I-170-P ***Aproximación Sintética Ambientalmente Amigable para la Obtención de Imidazoquinolinas y Exploración de su Potencial Actividad Inhibitoria de Colinesterasas*** 433

I-171-P ***Nuevos hallazgos a partir de la reacción de Nazarov*** 434

I-172-P ***Síntesis y Evaluación de la Actividad Tripanocida in vitro de Compuestos Heterocíclicos Tipo Estirilquinolinas.*** 435

I-173-P ***Síntesis de Isobenzofuranonas 3-Sustituidas Mediante una Nueva Metodología Económica Libre de Disolvente.*** 436

I-174-P ***Síntesis del flavonoide hipoglucemiante 5,7-dihidroxi-2-(4'-hidroxi-3',5'-dimetoxifenil) croman-4-ona y análogos estructurales*** 437

I-175-P ***Obtención de β-Ocimeno Mediante Isomerización Fotocatalítica de α-Pineno*** 438

I-176-P ***Obtención de 3-Aminopirazolo[1,5-a]pirimidinas: Aplicación Sintética y Posterior Estudio Fotofísico para la Detección de Iones Metálicos*** 439

I-177-P ***Síntesis de Compuestos Híbridos de Pirazolina–Cumarina como Nuevos Quimiosensores para la Detección de Iones Metálicos*** 440

I-178-P ***Síntesis Eco-Amigable de 5-Aminopirazoles Utilizando Isoxazoles como Intermedios Estratégicos*** 441

I-179-P ***Síntesis de Nuevos Derivados de Espiro[pirimido[4,5-b]quinolina-5,5'-pirrolo[2,3-d]pirimidina]-trionas y Espiro[indolina-3,5'-pirido[2,3-d:6,5-d']dipirimidina]-trionas Mediante una Reacción Pseudo-tricomponente*** 442

I-180-P ***Avances en la Síntesis de Lachnanthopyrone*** 443

I-181-P ***Síntesis y caracterización de nuevos híbridos moleculares (E)-1-aril-3-(4-((E)-estiril)quinolin-2-il)prop-2-en-1-onas*** 444

I-182-P ***Síntesis de cinamidas derivadas de 4-piridincarboxaldehído con posible actividad antibacteriana.*** 445

I-183-P ***Síntesis de Nuevos Derivados de la Isatida a partir de Isatinas y Carburo de Calcio como C2-Sintón*** 447

I-184-P ***Optimización de la Síntesis de Derivados Terpiridínicos Bajo la Ruta de Kröhnke Asistida por Irradiación con Microondas*** 448

I-185-P ***Síntesis y Estudios de la Oxidación con Oxígeno Ambiental de 1,3,5-Triaril-4,5-Dihidro-1H-Pirazoles.*** 450

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-186-P ***Análisis Espectroscópico y Cristalográfico del Bencenosulfonato de 4-Metil-2-oxo-2H-cromen-7-ilo*** 451

I-187-P ***Síntesis de 1-(4-bromofenil)-5-(2,5-dimetil-1H-pirrol-1-il)-3-metil-1H-pirazol: Análisis espectroscópico, térmico y cristalográfico*** 453

I-188-P ***Estudios de Nuevos Pigmentos Electroactivos Obtenidos Mediante Síntesis Convergente, para su aplicación en Celdas Solares Sensibilizadas por Pigmentos (DSSCs).*** 454

I-189-P ***Uso Potencial de Sales de Vinil Sulfonio en la Síntesis de γ-Lactamas α-γ-Disustituidas.*** 455

I-191-P ***Síntesis de N-(Arilaminometil)-ftalimidas en Ausencia de Disolvente*** 456

I-192-P ***Síntesis de pigmentos electroactivos para su aplicación en celdas solares sensibilizadas por pigmentos DSSCs a partir de acetofenona.*** 457

I-239-P ***Síntesis "one-pot" de 3-benzoil-4-estiril-2-metilquinolinas y su transformación en nuevos híbridos moleculares (E)-2-(3-benzoil-4-estirilquinolin-2-il)-3-fenilquinazolin-4(3H)-ona*** 458

I-306-P ***Obtención De Análogos Del Derivado Dibenzotiofenoimidazol-UBMC Como Potenciales Moléculas Anti-Leishmaniasis Mediante Reacción De Suzuki-Miyaura.*** 460

I-352-P ***Síntesis verde y caracterización vibracional de la 2,3-difenil-2,3-dihidroquinazolin-4(1H)-ona*** 461

I-390-P ***Síntesis de Derivados 2-(arililideneamino)-3-(1H-indol-3-il)-2,3-dihidro-1H-isoindol-1-ona*** 463

I-391-P ***1,3-Ditianilización de Anillos Aromáticos: Síntesis de Hidroxi y Metoxi Aldehídos Protegidos con Ditioacetales y su Desprotección con (COCl)_2*** 464

I-423-P ***Una Estrategia Sintética Libre de Grupos Protectores para la Preparación de Alnustonas y su Evaluación en Dos Líneas Celulares de Cáncer.*** 465

I-424-P ***Conversión de 3-Formail- a 3-HidroxiPirazolo[1,5-a]pirimidinas via Descarboxilación Oxidativa: Estudio Fotofísico y Detección de Metales.*** 466

I-425-P ***Reacción de 4-hidroxibencilamina con Formaldehído*** 468

I-433-P ***Síntesis Verde y Caracterización de Conjugados de N-Ariloxietil-2-metil-5-nitroimidazoles*** 469

I-441-P ***Síntesis Mecanoquímica de Derivados de 2-Anilino-3-Cloro-1,4-Naftoquinonas Catalizada por Sulfato de Aluminio Mineral.*** 470

I-451-P ***O-Sulfonilación regioselectiva de 3-cianopiridin-2(1H)-onas 4,6-diariladas*** 471

I-453-P ***Síntesis Y Caracterización De Nuevos Híbridos Moleculares De La Quinolina Enlazada A Unidades Estirilo Y Chalcona, Potenciales Agentes Antioxidantes*** 473

I-458-P ***Síntesis de Nuevos Híbridos Moleculares 4-(4-Hidroxi-3-Metoxifenil) Tetrahidroquinolina/1,2,3-Triazol, Compuestos con Potencial Actividad Anticancerígena*** 474

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-460-P ***La Condensación de Claisen–Schmidt y la Adición aza-Michael como Pasos Clave en la Síntesis Efectiva de Nuevos Híbridos Moleculares 7–(2,4–dimetilquinolin–3–il)–1,3–dimetil–5–arilpirido[2,3–d]pirimidina–2,4(1H,3H)–diona*** 475

I-468-P ***Síntesis y Caracterización Estructural de Nuevos Derivados de N-Acetonitril-4-(2'-oxopirrolidin-1'-il)- 1,2,3,4-Tetrahidroquinolina vía Reacción Povarov Catiónica, con Potencial Actividad Antioxidante.*** 477

QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL 478

III-200-P ***Estudio Computacional de la Absorción y la Fluorescencia de los Derivados Butadienil y Estiril de la Metilfeoforbida a y de la Zn-Metilfeoforbida a*** 478

III-201-P ***Estudio Computacional sobre el Espectro Infrarrojo del Componente Mayoritario de la Estevia (Esteviósido)*** 479

III-202-P ***Evaluación de GFN-FF y GFN-xTB para el Estudio de Interacciones entre Nanopartículas de Ag con Moléculas Pequeñas*** 480

III-203-P ***Cálculo de Energías de los Primeros Estados Excitados Singlete y Triplete, y Espectros de Absorción y de Fluorescencia con Resolución Vibracional del Trimetil Éster de Clorina e6 y su Derivado con Zinc*** 481

III-204-P ***Evaluación Computacional de la Actividad Antiinflamatoria de Compuestos Obtenidos a partir de Subproductos (Semilla y Corteza) del Aguacate (Persea americana Mill.)*** 482

III-205-P ***Estudio Teórico de los Procesos Fotofísicos de la Metilfeoforbida a*** 483

III-207-P ***Susceptibilidad del parásito Trypanosoma cruzi frente a moléculas tipo carbenos N-Heterocíclicos empleando técnicas computacionales*** 484

III-209-P ***Acoplamiento Molecular de Potenciales Inhibidores de Niemann Pick C1, Involucrada en la Transmisión del Virus del Ébola*** 485

III-210-P ***Aplicación de Técnicas de Machine Learning a la Clasificación y Predicción de Mutagenicidad de Acrilatos*** 486

III-212-P ***Reviewing the Vibrational Halocarbon Greenhouse Gases from Density Functional Theory Calculations*** 487

III-231-P ***Velocidad de Oxidación y Evolución de Cristalinidad en Nanopartículas de Plata a Temperaturas Altas*** 488

III-257-P ***Novel Imidazolium-Based Ionic Liquid/Mordenite composites for hydrogen capture and storage. An ONIOM-DFT study*** 489

III-270-P ***Evaluación in silico de los parámetros termodinámicos del complejo activado en reacciones ion-molécula y molécula-radical en el medio interestelar en un rango de (20 a 300) K*** 490

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-291-P ***Estudio In Silico De Las Propiedades Interfaciales De Emulsiones W/O A Base De Componentes Lipidicos De Theobroma cacao L.*** 491

III-301-P ***Estudio computacional y termodinámico del equilibrio líquido-vapor para el sistema binario y ternario con cloroformo, acetona y benceno a 101,33 kPa.*** 492

III-317-P ***Diseño de Moléculas Análogas de Flavonoides Aislados de Plantas Colombianas con Potencial Aplicación Farmacéutica en el Tratamiento de la Diabetes*** 493

III-318-P ***Identificación y Caracterización de los Sitios de Unión del Colesterol de Membrana en el Receptor CB1 mediante Dinámica Molecular.*** 494

III-319-P ***Diseño de Moléculas Análogas de Flavonoides Aislados de Plantas Colombianas con Potencial Aplicación Farmacéutica en el Tratamiento de la Diabetes*** 495

III-340-P ***Incorporación del Campo Magnético en el Algoritmo Velocity Verlet en el paquete GROMACS*** 496

III-342-P ***Diseño In Silico y Estudios Preliminares de Síntesis de Análogos de Bencimidazol con Potencial Actividad Antileishmanial.*** 497

III-344-P ***Predicción de la Composición SARA del Petróleo Empleando FTIR-ATR y Métodos de Machine Learning*** 499

III-389-P ***Análisis Metabolómico de Pseudelephantopus spicatus y Cribado Virtual Inverso para la Búsqueda de Blancos Farmacológicos*** 500

III-393-P ***Fitocannabinoides: Descifrando su Relación con Targets y Enfermedades mediante Farmacología de Redes*** 501

III-395-P ***Evaluación Computacional de la Adsorción de Ácido Aminometilfosfónico en grafeno y grafeno dopado con metales de transición*** 502

III-405-P ***Caracterización del Flujo de Agua a Través de Acuaporinas TIP3;1 de Semillas de Maíz por Dinámica Molecular*** 503

III-432-P ***Modelo de Interacción a través de un Estudio Computacional De Las Metaloenzimas Cyp96t1 Y Cyp96t6 En La Reacción Catalítica Sobre 4-O-Metilnorbelladina*** 504

III-449-P ***Estudio Computacional de Variaciones Sobre el Gen CNR1 y sus Implicaciones en la Interacción del Receptor CB1 con el Rimonabant*** 507

III-478-P ***Estudio teórico de las propiedades magnéticas de magnetitas (Fe2.875X0.125O4) modificadas con vacancias y dopantes de la primera serie de transición*** 509

QUÍMICA VERDE Y SOSTENIBLE 510

VI-218-P ***Estudio Comparativo de Catalizadores FeOx/SiO2, VOx/SiO2, WOx/SiO2 y VOx-WOx/SiO2 Sintetizados por el Método Sol-Gel en la Conversión de Xilosa a Furfural*** 510

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VI-220-P ***Evaluación de la Obtención de Biodiesel Mediante Transesterificación Enzimática a Partir de Aceite de Cocina Usado Asistido por Microondas.*** 511

VI-221-P ***Estudio Termodinámico y Cinético de la Valorización de Derivados Fenólicos Provenientes de la Biomasa del Pseudotallo del Plátano Dominico-Hartón (Musa AAB Simmonds)*** 512

VI-222-P ***Estudio Preliminar del Crecimiento de la Microalga de Agua Dulce Chlorella vulgaris en Medio Líquido Contaminado con Loratadina*** 513

VI-223-P ***Síntesis Mecanoenzimática de Péptidos Derivados de la (S)-Prolina y la (S)- Fenilalanina*** 514

VI-309-P ***Obtención de Biocarbón a Partir de Biomasa del Procesamiento de Pulpa de Asaí (Euterpe precatoria Mart.)*** 515

VI-351-P ***Uso de una Nueva Técnica para Extracción de Compuestos Fitoquímicos de Tradescantia zebrina y Juglans neotropica Mediante Combinación de Micoextracción en Fase Sólida y un Dispositivo de Disco Rotatorio.*** 516

VI-370-P ***Extracto total de Lippia alba como agente reductor en la síntesis no convencional de nanopartículas magnéticas híbridas asistida por microondas.*** 517

VI-484-P ***Evaluación del Potencial de Producción de Hidrógeno a Partir de Biogás en Colombia Empleando Aspen Hysys.*** 518

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

PRESENTACIONES MODALIDAD ORAL

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

BIOQUÍMICA Y TECNOLOGÍA

VII-1-O EVALUACIÓN DE LA MODIFICACIÓN QUÍMICA DE LA LIPASA THERMOMYCES LANUGINOSUS PARA LA OBTENCIÓN DE DERIVADOS GLIOXIL-AGAROSA APLICADOS A LA PRODUCCIÓN DE BIODIESEL.

Evaluación de la Modificación Química de la Lipasa *Thermomyces lanuginosus* para la Obtención de Derivados Glioxil-Agarosa Aplicados a la Producción de Biodiesel.

Juan S. Pardo-Tamayo, Oscar L. Alférez, Evelyn L. Guerrero-Tobar, Leidy Lerma, *César A. Godoy*.

Laboratorio de Investigación en Biocatálisis y Biotransformaciones (LIBB),
Grupo de Investigación en Ingeniería de los Procesos Agroalimentarios y Biotecnológicos (GIPAB),
Departamento de Química, Universidad del valle,
Cl. 13 #100-00
e-mail: juan.sebastian.pardo@correounivalle.edu.co,.
** Autor de correspondencia: cesar.godoy@correounivalle.edu.co*

Palabras Claves: Biotecnología, biocatálisis, inmovilización covalente, modificación enzimática, biodiesel.

En Colombia, la producción y uso del biodiesel se presenta como una alternativa para reducir la dependencia hacia los combustibles fósiles. Las lipasas microbianas aplicadas en la producción de ésteres de ácidos grasos (FAEs, principal componente del biodiesel) son una alternativa más verde que los catalizadores industriales convencionales [1]. Sin embargo, su implementación implica un mayor gasto económico. La inmovilización covalente de enzimas en glioxil-agarosa (Gx),[2,3,4] podría ser la solución, pues promueve alta estabilización y reutilización enzimática, reduciendo costos, aunque se limita a enzimas con alta disponibilidad de residuos lisil y que sean resistentes a pH>10; esto no lo cumplen lipasas comerciales como la proveniente de *Thermomyces lanuginosus* (TLL).[3,5] En este trabajo se propuso la modificación de los grupos carboxilato de TLL con dihidrazidas carbónica (TLL-CZ), oxálica (TLL-OX), succínica (TLL-SC) y adípica (TLL-AA), para generar puntos de unión enzima-soporte Gx estables a menor pH. Así, TLL se modificó hasta un 50%, recuperando ≈90% de proteína y una actividad hidrolítica que superó a TLL sin modificar. Frente a ésta, las enzimas hidrazidadas fueron hasta 1,2 veces más activas (k_{cat}=100s^{-1}), exceptuando TLL-OX, además TLL-CZ presentó un k_m 1,7 veces menor (0,6 mM) (**Figura 1**) y k_{cat}/k_m=139,4 $s^{-1}mM^{-1}$, sugiriendo que las modificaciones estabilizan la conformación activa y que la inclusión de grupos modificantes con menor impedimento estérico favorece el acceso del sustrato al sitio activo. Hasta donde se sabe, es la primera vez que se inmovilizan enzimas hidrazidadas en Gx a pH neutro (>90%), consiguiendo derivados activos en contraste con el de la lipasa modificada convencionalmente con etilendiamina.[4] El derivado Gx-TLL-AA fue el más activo en hidrólisis (20,8 UI/g) y en producción de FAEs (78%, 24 h), sugiriendo que brazos espaciadores largos minimizan la rigidez enzimática favoreciendo la catálisis. Cabe resaltar que los nuevos derivados reducen hasta 8,4 veces el gasto enzimático frente al de derivados comerciales como Lipozyme® (42 mg/g). Además, dada la versatilidad de TLL, los nuevos biocatalizadores podrían emplearse en la resolución de mezclas

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

racémicas o en la síntesis de productos farmacéuticos,[6] acercando la transición de la industria química a la implementación de procesos más verdes fundamentados en desarrollos biotecnológicos.

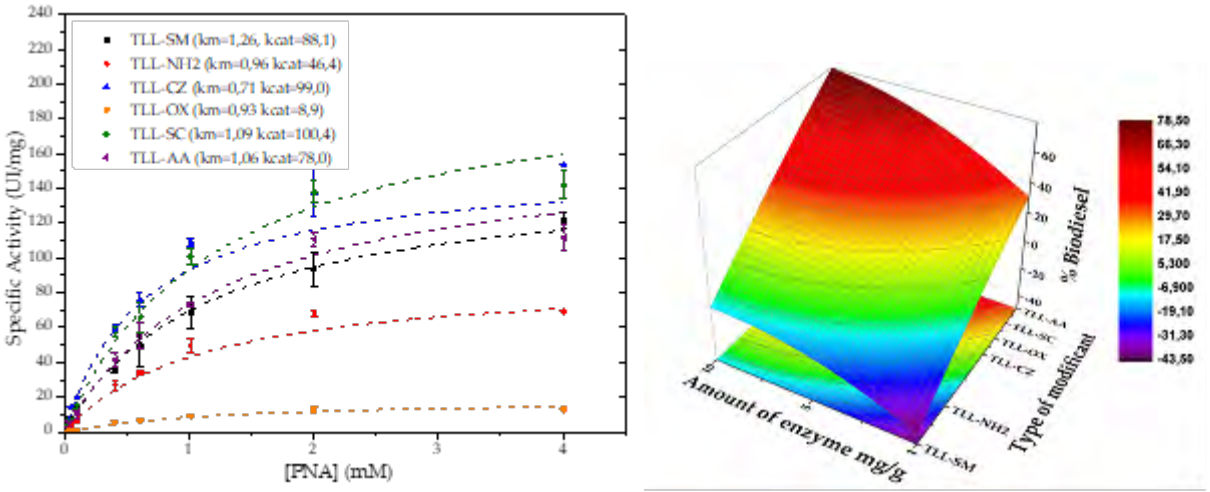


Figura 1. A) Curvas de Michaelis-Menten para las enzimas hidrazidadas y las de control **B)** Porcentajes de biodiesel obtenido a partir de los nuevos derivados en comparación con los derivados convencionales.

Referencias

1. Melani, N. B.; Tambourgi, E. B.; Silveira, E. Lipases: From Production to Applications. *Separation & Purification Reviews* **2020**, *49* (2), 143–158.
2. Khan, R. S.; Rather, A. H.; Wani, T. U.; Rather, S.; Amna, T.; Hassan, M. S.; Sheikh, F. A. Recent Trends Using Natural Polymeric Nanofibers as Supports for Enzyme Immobilization and Catalysis. *Biotech & Bioengineering* **2023**, *120* (1), 22–40.
3. Lopez-Gallego, F.; Fernandez-Lorente, G.; Rocha-Martı, J.; Bolivar, J. M.; Mateo, C.; Guisan, J. M. Multi-Point Covalent Immobilization of Enzymes on Glyoxyl Agarose with Minimal Physico-Chemical Modification: Stabilization of Industrial Enzymes.
4. Godoy, C. New Strategy for the Immobilization of Lipases on Glyoxyl–Agarose Supports: Production of Robust Biocatalysts for Natural Oil Transformation. *IJMS* **2017**, *18* (10), 2130.
5. Mateo, C.; Palomo, J. M.; Fuentes, M.; Betancor, L.; Grazu, V.; López-Gallego, F.; Pessela, B. C. C.; Hidalgo, A.; Fernández-Lorente, G.; Fernández-Lafuente, R.; Guisán, J. M. Glyoxyl Agarose: A Fully Inert and Hydrophilic Support for Immobilization and High Stabilization of Proteins. *Enzyme and Microbial Technology* **2006**, *39* (2), 274–280.
6. Pinheiro, M. P.; Rios, N. S.; Fonseca, T. de S.; Bezerra, F. de A.; Rodríguez-Castellón, E.; Fernandez-Lafuente, R.; Carlos de Mattos, M.; dos Santos, J. C. S.; Gonçalves, L. R. B. Kinetic Resolution of Drug Intermediates Catalyzed by Lipase B from Candida Antarctica Immobilized on Immobead-350. *Biotechnology Progress* **2018**, *34* (4), 878–889.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-2-O ***CARACTERIZACIÓN DE BIOBASADOS FOTOACTIVOS A BASE DE ALMIDÓN MODIFICADO Y SU EFECTO SOBRE LA CONSERVACIÓN DEL QUESO PAIPA.***

Caracterización de biobasados fotoactivos a base de almidón modificado y su efecto sobre la conservación del queso Paipa.

Laura P Joya [a*], **Nury A Manosalva** [b], **Angélica M García** [c]

[a,b,c] *Grupo de Investigación en Química y Tecnología de Alimentos, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Colombia*
** Autor de correspondencia:* laura.joya01@uptc.edu.co

Palabras Clave: biobasados; fotooxidación; propiedades fisicoquímicas; queso Paipa.

Los recubrimientos alimentarios de un solo uso obtenidos de derivados petroleoquímicos, afectan tanto la estabilidad como la preservación del medio ambiente, debido a que no son renovables y carecen de biodegradabilidad [1]. Como recurso, se han desarrollado biobasados activos, que son empaques elaborados de fuentes renovables que contienen sustancias que ejercen funciones adicionales de protección [2]. En la presente investigación se evaluaron las propiedades fisicoquímicas (permeabilidad a los aceites, transparencia, estabilidad en medio ácido/básico y morfología) de biobasados obtenidos a partir de almidón modificado de papa unido al flavonoide curcumina, así como su eficacia en la fotoprotección frente a procesos oxidativos de lípidos en el queso Paipa (cuantificación de óxidos lipídicos primarios, empleando el índice de peroxidación lipídica-IPL). El desarrollo metodológico contempló dos tratamientos: 1) biobasado de almidón modificado (control) y 2) biobasado de almidón modificado unido a curcumina (B.Cur).

En cuanto al estudio de las propiedades fisicoquímicas, se encontró un aumento del 55.09 % en la transparencia del B.Cur. A su vez, este biobasado mostró una mayor estabilidad en medio ácido y básico (un 28.57 y 66.66 % más en relación con el control, respectivamente); y baja permeabilidad a los aceites. Respecto a la microestructura, en B.Cur se evidenció una alta homogeneidad superficial con ausencia de grietas o fisuras. Por su parte, el IPL encontrado en el queso recubierto con B.Cur, fue de 47.23 meqO_2/kg; siendo significativamente inferior a lo obtenido con el biobasado control (119.17 meqO_2/kg). De acuerdo con estos resultados, se destaca la funcionalidad de los biobasados unidos a curcumina al utilizarse como empaque en alimentos, debido a que, además de emplearse como alternativa de los plásticos de un solo uso, también reduce la formación de óxidos lipídicos primarios, los cuales afectan la calidad nutricional y sensorial de alimentos con alto contenido graso, como es el caso del queso Paipa.

REFERENCIAS

[1] J. Tan, S. Tiwari, and S. Ramakrishna, “Single-Use Plastics in the Food Services Industry: Can It Be Sustainable?,” Mater Circ Econ, vol. 3, pp. 1-7, 2021, doi: 10.1007/s42824-021-00019-1.

[2] J. Li, et al., “Combined effects of octenylsuccination and oregano essential oil on sweet potato starch films with an emphasis on water resistance,” International Journal of Biological Macromolecules, vol. 115, pp. 547–553, 2018, doi: 10.1016/j.ijbiomac.2018.04.093.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-3-O ***PRODUCCIÓN DE ANTICUERPOS POLICLONALES IGY ANTI-SPCAS9 PARA SU USO EN INVESTIGACIÓN CRISPR/CAS***

Producción De Anticuerpos Policlonales Igy Anti-SpCas9 Para Su Uso En Investigación CRISPR/Cas

Esteban León[1*], Valentina Ortiz[1], Alexander Pérez[1], Jair Téllez[2], Gonzalo J Díaz[3], María H Ramírez[1] & Luis E Contreras[1]

[1]Laboratorio de Investigaciones Básicas en Bioquímica, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia
[2]Escuela de Pregrado, Dirección académica, Universidad Nacional de Colombia, Sede de La Paz, Colombia
[3]Laboratorio de Toxicología, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia
** Autor de correspondencia: jgutierrezl@unal.edu.co*

Palabras clave: anticuerpos; *Leishmania braziliensis*; CRISPR-Cas9; IgY

El propósito del presente trabajo fue producir anticuerpos policlonales IgY anti-SpCas9 para su uso en aplicaciones CRISPR/Cas.

La metodología desarrollada consistió en inocular gallinas HyLine Brown con la proteína SpCas9-6xHis expresada y purificada desde *Escherichia coli* BL21(DE3) mediante precipitación por salado y cromatografía de afinidad a metales inmovilizados (IMAC). Los anticuerpos IgY anti-SpCas9 se purificaron desde yema de huevo estandarizando un protocolo de delipidación con pectina y precipitación con sulfato de amonio. Los anticuerpos obtenidos se caracterizaron mediante ELISA indirecto, Western blot y Dotblot, mientras que su utilidad para detectar SpCas9 en muestras biológicas se verificó por Western blot sobre extractos proteicos de promastigotes de *Leishmania braziliensis* que expresan de manera constitutiva esta proteína a partir del plásmido episomal pTB007-Viannia.

Los resultados mediante la delipidación de las yemas de las gallinas inmunizadas y su precipitación por salado, permitió obtener fracciones enriquecidas con anticuerpos policlonales IgY anti-SpCas9. Estos anticuerpos detectaron una cantidad mínima de antígeno de 10 ng a una dilución máxima de 1:5000, siendo específicos por el antígeno SpCas9-6xHis. Adicionalmente, los anticuerpos anti-SpCas9 reconocieron la proteína SpCas9 en muestras de *L. braziliensis*, confirmando su utilidad para la implementación del sistema CRISPR/Cas en este modelo parasitario.

En conclusión, la producción de anticuerpos policlonales IgY anti-SpCas9 útiles para realizar estudios basados en CRISPR/Cas, se completó aplicando un esquema de inmunización aviar y el aislamiento de anticuerpos a partir de yemas inmunes mediante un método sencillo. Estos anticuerpos permitieron la inmunodetección de SpCas9 en promastigotes de *L. braziliensis* que expresan de manera constitutiva esta proteína exógena. Por lo tanto, el método presentado para producir anticuerpos IgY anti-SpCas9, facilitará los estudios basados en CRISPR/Cas en parásitos protozoarios.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-8-O ***USO DE MACHINE LEARNING PARA LA PREDICCIÓN DE PREECLAMPSIA CON ESPECTROMETRÍA DE MASAS MALDI-TOF.***

Uso de *Machine Learning* para la Predicción de Preeclampsia con Espectrometría de Masas MALDI-TOF.

Luisa F Amézquita[a], Laura C Maca[b],* Paula K Bautista[c], Claudia C Colmenares[c], Yuly A Prada[d], Tania M Gutierrez[b] , Norma C Serrano[c], Enrique M Ospino[d]

[a] *Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Colombia.*
[b] *Grupo de Investigación en Procesos Electroquímicos (GIPEL), Universidad del Cauca, Colombia.*
[c] *Centro de Investigaciones, Fundación Cardiovascular de Colombia, Colombia.*
[d] *Laboratorio de Espectrometría atómica y molecular (LEAM), Universidad Industrial de Santander, Colombia*
**Autor de correspondencia: lauracmaca@unicauca.edu.co*

Palabras Claves: Pre-Eclampsia; Péptidos; Espectrometría de masas; MALDI-TOF, Ciencia de Datos.

A nivel mundial, los trastornos hipertensivos del embarazo donde se incluye la Preeclampsia (PE) son una de las principales causas de morbilidad, mortalidad, hospitalización y utilización de recursos tanto para las madres como para sus recién nacidos, no obstante, hasta la fecha su etiología no ha sido del todo dilucidada y tampoco contamos con biomarcadores fuertes que permitan su predicción [1]. Bajo estas consideraciones, en este trabajo propusimos obtener la huella peptídica de sueros sanguíneos de mujeres con PE y mujeres gestantes sanas con el fin de estudiar diferencias significativas que permitan al diagnóstico oportuno y por ende el tratamiento médico adecuado. En este trabajo se emplearon 164 muestras de suero sanguíneo de pacientes, 67 casos y 97 controles. Las muestras sanguíneas fueron tratadas por digestión tríptica usado un método preparativo asistido por un filtro conocido como *FASP* [2]. Los fragmentos de péptidos obtenidos fueron analizados por espectrometría de masas con ionización/desorción láser asistida por una matriz con analizador de tiempo de vuelo (MALDI-TOF-MS). La matriz empleada en el proceso fue el ácido α-ciano-4-hidroxicinamico (HCCA) y los espectros fueron recolectado en un rango de señales con relación/masas de 500 a 6000 Da. Los datos recolectados se trataron con el software ANACONDA para aplicar herramientas de *Machine learning* para encontrar diferencias entre los perfiles de cada grupo de estudio [3]. Se ejecutaron dos modelos, uno supervisado y otro no supervisado usando Python y distintos métodos de procesamiento de los datos para remover ruido, filtrar señales y eliminar componentes que agregaban complejidad al modelo. En el primer modelo se usó regresión logística con una precisión máxima de 0,67. Para el segundo modelo se usó el análisis de componentes principales (PCA) para disminuir el número de señales y se obtuvo una precisión del 0,75. Aunque los dos modelos evidenciaron una variación no significativa entre los dos grupos de dato se han propuesto otros algoritmos como redes neurales e *isolation forest* ya que la naturaleza de los datos requiere de incluir otras consideraciones para crear un modelo predictivo a partir de ellos.

Referencias:

[1] Sinkey RG, Battarbee AN, Bello NA, Ives CW, Oparil S, Tita ATN. Prevention, Diagnosis, and Management of Hypertensive Disorders of Pregnancy: a Comparison of International Guidelines. Curr Hypertens Rep. 2020 Aug 27;22(9):66. doi: 10.1007/s11906-020-01082-w. PMID: 32852691; PMCID: PMC7773049.
[2] Wiśniewski, J. R. (2019). Filter aided sample preparation–a tutorial. Analytica chimica acta, 1090, 23-30.
[3] Rolon-Mérette, D., Ross, M., Rolon-Mérette, T., & Church, K. (2016). Introduction to Anaconda and Python: Installation and setup. Quant. Methods Psychol, 16(5), S3-S11.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-310-O ***MECANISMOS DE INMOVILIZACIÓN DE PLOMO POR BACTERIAS UREOLÍTICAS Y SU POTENCIAL PARA LA REMEDIACIÓN DEL METAL***

Mecanismos de Inmovilización de Plomo por Bacterias Ureolíticas y su Potencial para la Remediación del Metal

Laura S. Pineda*, Pedro F. B. Brandão

Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Grupo de Estudios para la Remediación y Mitigación de Impactos Negativos al Ambiente (GERMINA), Av. Carrera 30 # 45-03, 111321 Bogotá, Colombia

**Autor de correspondencia*: lspinedaf@unal.edu.co

Palabras clave: Bioprecipitación; biorremediación; Pb; MICP

La contaminación por plomo (Pb) se ha convertido en una creciente preocupación dadas sus múltiples fuentes de emisión, y el riesgo que representa para la salud y el medio ambiente por su toxicidad y permanencia en el ambiente. Recientemente, se ha explorado el método de precipitación de carbonatos inducida por microorganismos, MICP por sus siglas en inglés, utilizando bacterias ureolíticas (capaces de hidrolizar la urea) para inmovilizar el metal precipitándolo como carbonato poco soluble y reduciendo así su biodisponibilidad. En este trabajo se estudió el potencial de bioprecipitación de Pb de aislados bacterianos provenientes de fincas agrícolas de Santander, Colombia, así como la contribución de diferentes mecanismos de remediación de los aislados más promisorios. Luego de 72 h en medio líquido suplementado con urea (20 g L^{-1}) y Pb (70 mg L^{-1}), se determinó la actividad ureolítica usando el método de fenol-hipoclorito para cuantificar el amonio producido por cada aislado luego de la hidrólisis de la urea, se determinó el pH final del medio, y se cuantificó el Pb no bioprecipitado mediante Espectroscopía de Absorción Atómica con llama (AAS). La mayoría de los aislados presentaron baja actividad ureolítica (<500 mg NH_4^+ L^{-1}) y una remoción de Pb inferior al 18%, otros aislados mostraron una actividad media, entre 500 y 1000 mg NH_4^+ L^{-1}, con remociones cercanas al 20%, y 4 aislados exhibieron la mayor actividad (>1000 mg NH_4^+ L^{-1}), correlacionándose con un aumento del pH hasta 9,5, y una remoción superior al 96%. Adicionalmente, para los aislados seleccionados se realizó un ensayo de 72 h en el mismo medio sin adicionar urea para cuantificar por AAS la fracción de Pb asociada a otros 2 mecanismos principales de remoción de metales que presentan las bacterias (biosorción y bioacumulación), encontrando que la bioprecipitación no es el único mecanismo relevante en el proceso, sino que hay un aporte de la biosorción sobre la remoción del metal. Finalmente, los resultados obtenidos en este estudio evidencian el potencial de inmovilización de Pb por bacterias ureolíticas aisladas de suelos agrícolas para ser utilizados en tratamientos de biorremediación de este metal.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-343-O ***ENFOQUE BIOFÍSICO SOBRE LA ACTIVIDAD ANTITUMORAL DE LA CROTALICIDINA EN EXTRACTOS Y MODELOS DE MEMBRANA CELULAR DE CÁNCER DE SENO***

Enfoque biofísico sobre la actividad antitumoral de la crotalicidina en extractos y modelos de membrana celular de cáncer de seno

Maria C. Klaiss-Luna[a], Juan M. Giraldo-Lorza[a], Marcela Manrique-Moreno[a]*

[a] *Grupo de Bioquímica Estructural de Macromoléculas, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquía, Colombia*

** Autor de correspondencia: marcela.manrique@udea.edu.co*

Palabras Claves: Modelos de membrana; péptidos bioactivos; bicapa lipídica; interacción lípido-péptido.

Los péptidos bioactivos han surgido como potenciales candidatos para el tratamiento del cáncer de seno. La crotalicidina es un péptido derivado de veneno de serpiente de 34 residuos, catiónico, con propiedades antimicrobianas y antitumorales, a través de un mecanismo de acción de formación de poros en membranas bacterianas[1,2]. Sin embargo, el mecanismo de acción en membranas eucariotas es aún desconocido. El objetivo de este estudio consistió en evaluar la interacción de la crotalicidina con extractos lípidicos de líneas celulares de cáncer de seno MCF-7, MDA-MB-231, y de queratinocitos humanos HaCaT; así como con los modelos sintéticos representativos de estas membranas y los lípidos puros PC, PE, SM, PS para así entender las bases moleculares responsables del mecanismo de acción antitumoral utilizando espectroscopia infrarroja. Se empleó el espectrómetro Tensor II con los aditamentos 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 $\nu_s(CH_2)$ del núcleo hidrofóbico, un marcador sensible del empaquetamiento de la bicapa lipídica. 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 sugieren que la crotalicidina es activa en lípidos de membranas eucariotas y ejerce un efecto dependiente a la concentración y al sistema evaluado con potencial inserción en membrana. Se destaca además el aumento en la estructura helicoidal del péptido en presencia de ambientes lipídicos, especialmente cargados negativamente. Este estudio sugiere que las diferencias en el perfil lipídico de las células tienen consecuencias considerables en la interacción con el péptido que modulan la unión y la actividad.

Agradecimientos: Proyecto MinCiencias 111584467189, RC-946-2019.

Referencias

1. Pérez-Peinado et al. Journal of Biological Chemistry, vol. 293, 2018.
2. Falcao et al. Journal of Medicinal Chemistry, vol. 58, 2015.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-378-O ***DEGRADACIÓN BILÓGICA DE SOLUCIONES DE CIANURACIÓN: RETOS Y OPORTUNIDADES PARA MICROORGANISMOS Y SUS ENZIMAS***

Degradación Bilógica de Soluciones de Cianuración: Retos y Oportunidades para Microorganismos y Sus Enzimas

Aram J. Panay[a]*

[a] *Departamento de Química, Universidad del Valle, Colombia*
**Autor de correspondencia: aram.panay@correounivalle.edu.co*

Palabras Clave: cianuro; degradación biológica; cianuro dihidratasa, minería de oro

Colombia ha visto un crecimiento exponencial de la minería de oro y con este, el aumento de la contaminación con compuestos altamente tóxicos como mercurio y cianuro. Si bien el cianuro es más contenible que mercurio, el cianuro es igualmente toxico para los seres vivos, por lo que es necesario contar con alternativas para el tratamiento efectivo de las aguas residuales del proceso de extracción de oro. Entre las alternativas de degradación existen métodos biológicos basados en microorganismos o sus enzimas. En esta presentación se busca resumir los avances y retos encontrados en el uso de microorganismos y sus enzimas para la degradación biológica de estas soluciones. En particular se explorará el uso de microorganismos endógenos de ambientes con cianuro y el uso de la enzima cianuro dihidratasa (CynD) de *Bacillus pumilus* como una alternativa biotecnológica para la degradación de cianuro en aguas provenientes de la industria minera. Con el objetivo de identificar microorganismos con capacidad de degradar cianuro se exploraron plantas de procesamiento de yuca amarga, la cual tiene contenido elevado de cianuro. Si bien se aislaron bacterias con capacidad de degradar este compuesto, estos no fueron capaces de sobrevivir a altas concentraciones de cianuro. Por otra parte, el gen que codifica por la enzima CynD de de *Bacillus pumilus* fue clonado en un plásmido de expresión bacteriana. Bacterias de *E.coli BL21DE3* que fueron transformadas con este plásmido fueron usadas en estudios de degradación de cianuro. La enzima CynD producida de manera recombinante en *E.coli* presentó bajos niveles de solubilidad, y se obtuvieron bajos rendimientos de purificación. Sin embargo, se probó la capacidad de las células completas de *E.coli* que expresan CynD de degradar cianuro a diferentes valores de pH, temperatura y se retó el sistema a aguas residuales de cianuración minera. Mediante estos experimentos se encontró que CynD, en las células completas, tienen una mayor resistencia al pH, la temperatura, que lo reportado para la enzima purificada. Además, en 30 minutos se logró degradar hasta el 70% del cianuro de una solución de cianuración minera.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-410-O ***CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL Y ACTIVIDADES ANTICOAGULANTES Y ANTITROMBÓTICAS DE GLICOCONJUGADOS SULFATADOS***

Caracterización Estructural y Actividades Anticoagulantes y Antitrombóticas de Glicoconjugados Sulfatados

Yony Román O.[a]

[a] *Grupo de Investigación de Bioquímica de Carbohidratos (BIOCAB). Departamento de Química, Universidad de Los Andes, Colombia.*

**Autor de correspondencia: y.romanochoa@uniandes.edu.co*

Palabras claves: Polisacárido, glicoconjugados, caracterización, NMR

Las alteraciones en el sistema hemostático causan enfermedades como el tromboembolismo arterial y venoso. Estas enfermedades han sido prevalentes en la sociedad conllevando a una taza alta de mortalidad a nivel mundial. Actualmente, los disturbios de coagulación sanguínea son tratados con agentes anticoagulantes y antitrombóticos. La heparina es el medicamento, más reconocido y estipulado internacionalmente, con acción inmediata de la regulación sanguínea. No obstante, en el tratamiento con heparina se pueden observar efectos colaterales como Trombocitopenia Inducida por Heparina (HIT) la cual incrementa aún más la trombosis, así como reacciones cutáneas adversas como eczemas. Por este motivo, se ha venido incrementando alternativas para la búsqueda de nuevas biomoléculas con características estructurales y funcionales relacionadas a la heparina. La naturaleza estructural básica de la heparina ha llevado a la búsqueda de glicoconjugados, principalmente sulfatados, que presenten la misma actividad anticoagulante y antitrombótica. La actividad farmacológica de estos polisacáridos ha sido asociada a características estructurales como composición monosacárida, masa molecular (MW), tipo de enlaces químicos, configuración anomérica, grado de sulfatación (DS) y distribución de sulfatación.

Los polisacáridos generalmente son obtenidos de fuentes endémicas provenientes de plantas, algas, bacterias y/o animales, a través de procesos avanzados y estandarizados de extracción y purificación. Extraer, purificar, sulfatar y caracterizar polisacáridos derivados de fuentes endémicas nacionales, que presenten actividad anticoagulante, se pueden proyectar como potenciales agentes antitrombóticos. Es así como glicoconjugados derivados de diferentes fuentes cítricas se proyectan como posibles candidatos con actividad anticoagulante. La caracterización química y estructural de polisacáridos con potencial actividad anticoagulante y antitrombótica, así como otro tipo de aplicaciones biológicas tales como antioxidante, antinflamatoria y antimicrobiana, se han venido incrementando y desarrollando actualmente a nivel mundial. Por consiguiente, el estudio potencial científico-aplicado básico de estas moléculas es importante direccionándolo a las actividades anticoagulante y antitrombótica.

Referencias:

1. Román Ochoa, Y., Iacomini, M., Sassaki, G. L., & Cipriani, T. R. (2017). Sulfation of fucogalactan from Agaricus bisporus: Different patterns in the chemical structure and their effects on anticoagulant activity. *International Journal of Biological Macromolecules, 97*, 357–364. https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2017.01.035
2. Román, Y., de Oliveira Barddal, H. P., Iacomini, M., Sassaki, G. L., & Cipriani, T. R. (2017). Anticoagulant and antithrombotic effects of chemically sulfated fucogalactan and citrus pectin. *Carbohydrate Polymers*, *174*, 731–739. https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2017.06.110
3. Román, Y., Iacomini, M., Sassaki, G. L., & Cipriani, T. R. (2016). Optimization of chemical sulfation, structural characterization and anticoagulant activity of Agaricus bisporus fucogalactan. *Carbohydrate Polymers*, *146*, 345–352. https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2016.03.061
4. Shahraz, A., Lin, Y., Mbroh, J. et al. Low molecular weight polysialic acid binds to properdin and reduces the activity of the alternative complement pathway. Sci Rep 12, 5818 (2022). https://doi.org/10.1038/s41598-022-09407-2.
5. Groves, P. (2017). Diffusion ordered spectroscopy (DOSY) as applied to polymers. Polymer Chemistry, 8(44), 6700-6708.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-479-O ***UN ACERCAMIENTO IN SILICO DE LA SELECTIVIDAD Y AFINIDAD DE LA COLISTINA (POLIMIXINA E) A NIVEL INTERMOLECULAR SOBRE LOS MODELOS DE MEMBRANA DE STAPHYLOCOCCUS AUREUS Y ESCHERICHIA COLI MEDIANTE DINÁMICA MOLECULAR***

Un Acercamiento *in silico* de la Selectividad y Afinidad de la Colistina (Polimixina E) a Nivel Intermolecular sobre los Modelos de Membrana de *Staphylococcus aureus* y *Escherichia coli* mediante Dinámica Molecular

Yesid A. Aristizabal Salazar [a,*], José F. Oñate Garzón [b], Yamil Liscano Martínez [c]

[a] *Grupo de Investigación en Química y Biotecnología (QUIBIO), Universidad Santiago de Cali, Colombia*
[b] *Grupo de Investigación en Química y Biotecnología (QUIBIO), Universidad Santiago de Cali, Colombia*
[c] *Grupo de Investigación en Química y Biotecnología (QUIBIO), Universidad Santiago de Cali, Colombia*
* *Autor de correspondencia: yesid.aristizabal00@usc.edu.co*

Palabras claves: péptidos antimicrobianos; dinámica molecular; colistina; interacciones moleculares; diseño de fármacos

El propósito de este estudio es evaluar los mecanismos de selectividad-afinidad a nivel intermolecular de los residuos de aminoácido que conforman la estructura del lipopéptido catiónico de Colistina, cuya actividad antibacteriana principal es la permeabilización de la membrana lipídica hacia el grupo de bacterias Gram-negativas, lo que podría contribuir al diseño y desarrollo de futuros péptidos antimicrobianos (PAM). Se realizo la búsqueda en base de datos moleculares (Protein Data Bank) de estructuras caracterizadas de la Colistina. Se diseñaron dos modelos de membranas bacterianos, uno que representa al grupo de bacterias Gram-negativas, cuya composición de fosfolípidos es 80% fosfatidiletanolamina (POPE) y 20% fosfatidilglicerol (POPG) para *Escherichia coli* y otro del grupo de bacterias Gram-positivas, cuya composición es 58% fosfatidilglicerol (POPG) y 42% cardiolipina (PMCL) para *Staphylococcus aureus* utilizando la plataforma web CHARMM-GUI para su construcción. Utilizando el paquete computacional Gromacs, se realizó la simulación por dinámica molecular a un tiempo máximo de 50 ns. Se utilizo R Studio (interacciones tipo electrostáticas, hidrofílicas e hidrofóbicas) para el análisis de interacción molecular y para el análisis de energía libre de unión se utilizó *g_mmpbsa* una herramienta derivada de Gromacs que se fundamenta en el método de Poisson-Boltzmann de mecánica molecular (MM-PBSA). Los resultados indicaron que la presencia de grupos funcionales con carga positiva en los fosfolípidos, como en POPE, disminuyen la carga negativa sobre la superficie de membrana facilitando la interacción de residuos de aminoácidos con carga neta positiva de péptidos catiónicos. La anfipaticidad de POPE permite la interacción con los residuos de aminoácido catiónicos de la colistina, siendo el ácido 2,4-diaminobutirico (DAB) el aminoácido clave de la colistina para generar el acople inicial en cuanto a interacciones de tipo electrostática e hidrofílica (enlace de hidrogeno), además la treonina (THR) facilita las transiciones de interacción hidrofílicas a hidrófobas, para el acople e inserción de la colistina sobre la membrana. Como fase final, la cola hidrofóbica (sustituyente de ácido graso) de la colistina unido por enlace amida con el DAB facilita la transición de la región polar de los fosfolípidos al interior hidrofóbico. Estos estudios permiten dilucidar a nivel molecular, el papel que tiene cada residuo de aminoácido en los PAM, permitiendo caracterizar los mecanismos que lo hacen ser selectivos y afines frente a diferentes tipos de fosfolípidos que conforman las membranas bacterianas.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-494-O ***PRODUCCIÓN DE ANTICUERPOS RECOMBINANTES CONTRA LA PROTEÍNA NAD QUINASA DE PLASMODIUM FALCIPARUM: IMPLEMENTANDO LA TECNOLOGÍA PHAGE DISPLAY***

Producción de Anticuerpos Recombinantes contra la Proteína NAD Quinasa de *Plasmodium falciparum:* Implementando la Tecnología *Phage Display*

Miguel A. Melo[a], Luis F. Ospina[b], María H. Ramírez[a]*

[a] *Laboratorio de Investigaciones Básicas en Bioquímica (LIBBIQ). Universidad Nacional de Colombia, Colombia.*
[b] *Departamento de Farmacia, Universidad Nacional de Colombia, Colombia.*
** Autor de correspondencia: mhramirezh@unal.edu.co*

Palabras Claves: *Phage display*, NAD quinasa, *Plasmodium falciparum*, anticuerpo monoclonal

La tecnología *phage display* permite la generación de librerías de anticuerpos monoclonales para su uso en investigación, diagnóstico y terapia. En este estudio, se reporta la construcción de una librería inmune de anticuerpos presentados sobre bacteriófagos, contra la enzima NAD quinasa de *Plasmodium falciparum*, con el objetivo de producir una herramienta de inmunodetección que permita estudiar y caracterizar esta enzima, pues se ha propuesto como un posible blanco terapéutico dada su alta importancia metabólica.

La proteína NAD quinasa recombinante fue expresada en *E. coli* de forma truncada, y posteriormente purificada desde la fracción insoluble por IMAC en condiciones denaturantes. Para la construcción de la librería, un ratón hembra BALB/C de 6 semanas de edad fue inmunizado con 50 ug de la proteína purificada. Una vez establecida la respuesta inmune, el ratón se sacrificó y se sintetizó ADNc desde ARN obtenido del bazo de ratón. Los dominios variables de la cadenas ligeras y pesadas de los anticuerpos se amplificaron desde ADNc por PCR y se clonaron en el fásmido pSEX81. La presentación de la librería se realizó sobre el bacteriófago ayudador M13KO7ΔpIII, con posterior selección por afinidad en tres rondas sucesivas. Los anticuerpos-fago identificados como específicos contra la proteína NAD quinasa fueron aislados, y sus fásmidos se secuenciaron para la predicción del modo de unión a través de *docking* anticuerpo-antígeno.

Los análisis por PCR indicaron la correcta clonación de las cadenas ligeras y pesadas en el fásmido, con un tamaño de librería de $1x10^7$ cfu. Después de tres rondas sucesivas de *biopanning*, con un enriquecimiento de más de 50 mil veces, se lograron aislar 6 anticuerpos-fago monoclonales que detectaron la proteína NAD quinasa por el ensayo de ELISA. Un anticuerpo fue caracterizado más profundamente, demostrando límites de detección y cuantificación a 8.4 ng y 13 ng, respectivamente. La predicción del modo de unión del fragmento de anticuerpo a la proteína NAD quinasa, sugirió que la interacción de los CDRs estaba dirigida hacia los *loops* expuestos que integran el motivo de plegamiento *Rossman* de la proteína.

Finalmente, el uso de la tecnología *phage display* permitió la obtención de anticuerpos monoclonales recombinantes específicos contra la proteína de interés. Asimismo, se resalta la posibilidad de utilizar esta tecnología para la producción de una gran variedad de anticuerpos con otros motivos en nuestro país.

Este estudio fue financiado por el Sistema de Investigación y Extensión de la Universidad Nacional de Colombia, bajo el proyecto con código 48547.

VII-504-O ***EFECTO DE DERIVADOS IMIDAZOLICOS SOBRE LA ACTIVIDAD ENZIMÁTICA DE LA NICOTINAMIDA MONONUCLEOTIDO ADENILIL TRANSFERASA DE LEISHMANIA BRAZILIENSIS (LBNMNAT), ACERCAMIENTO BIOINFORMÁTICO Y EXPERIMENTAL.***

Efecto de Derivados Imidazolicos sobre la Actividad Enzimática de la Nicotinamida Mononucleotido Adenilil Transferasa de *Leishmania braziliensis* (LbNMNAT), acercamiento bioinformático y experimental.

William A Pérez-Mancipe [a] *. Luis E Contreras-Rodríguez [a]. Zuly J Rivera-Monroy [b]. María H Ramírez-Hernández [a].
[a] *Grupo de Investigaciones Básicas en Bioquímica (LIBBIQ), Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá.*
[b] *Grupo de Síntesis y Aplicación de Moléculas Peptídicas, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá.*
* *Autor de correspondencia:* wiperez@unal.edu.co

Palabras Claves: *Leishmania braziliensis*; NMNAT; inhibición enzimática; imidazol**.**

INTRODUCCIÓN

La leishmaniasis es una enfermedad causada por parásitos del género *Leishmania*, de importancia en países tropicales como Colombia. Aunque existen medicamentos para el tratamiento, estos presentan efectos no deseados. En la búsqueda de blancos terapéuticos se ha estudiado el metabolismo energético de *Leishmania braziliensis*, específicamente el dinucleótido de Adenina y nicotinamida (NAD^+) y la enzima central de su metabolismo la LbNMNAT, debido a su importancia para la supervivencia del parásito.

Los compuestos azolicos, considerados como una estructura base para el diseño de nuevos fármacos, se han utilizado para el tratamiento de esta parasitosis, en este trabajo se estudia el efecto de estos compuestos sobre la LbNMNAT recombinante, en aras de caracterizar las posibles interacciones.

OBJETIVO

Evaluar el efecto del imidazol y algunos derivados (Fenbendazol, Ketoconazol, Mebendazol y Metronidazol) sobre la actividad de la LbNMNAT recombinante.

MÉTODOS

Se realizaron estudios bioinformáticos de acoplamiento molecular de la enzima con los compuestos evaluados así, como con los sustratos ATP y mononucleótido de nicotinamida (NMN). En el estudio experimental se utilizó el sistema heterólogo de *Escherichia coli* (M15) para la generación de la recombinante, la cual fue purificada por IMAC. El proceso se monitoreo mediante SDS PAGE Coomassie. Finalmente, el efecto de los compuestos imidazolicos se evaluó por RP-HPLC.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

El análisis del acoplamiento molecular señala el potencial inhibitorio de los derivados imidazolicos, debido a que se ubican en el sitio catalítico, especialmente el ketoconazol y mebendazol donde las energías de unión superaron las del sustrato NMN. En el estudio experimental se encontraron efectos significativos ($p< 0.05$) solo con el grupo de los benzimidazoles; fenbendazol (120µM y 480µM) y el mebendazol (480µM) lo que podría estar asociado a la estructura de este grupo. Las concentraciones de inhibición son elevadas para un uso terapéutico; sin embargo, los resultados obtenidos pueden dar luces sobre el potencial del grupo benzimidazol.

CONCLUSIONES

De los compuestos evaluados se encontraron efectos inhibitorios con los benzimidazoles, por lo que se propone evaluar otros compuestos derivados, con el fin de determinar el potencial inhibitorio de este grupo.

FINANCIACIÓN

División de Investigación Sede Bogotá UNAL (DIB) Proyectos 48547 y 51194.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-511-O ***ESTUDIO DE LA TERAPIA COMBINATORIA DOXORRUBICINA + MEDICAMENTO NO CONVENCIONAL EN CÁNCER COLORRECTAL***

Estudio de la Terapia Combinatoria Doxorrubicina + medicamento no convencional en cáncer colorrectal

Carol Melo, Laura Galindo, Camila Castellanos, María Camila Gallardo, Julián Corredor, Elizabeth Jimenez*

Grupo de Bioquímica aplicada, Universidad de Los Andes, Colombia
* Autor de correspondencia: e.jimenezd@uniandes.edu.co

Palabras Claves: Sinergia, Doxorrubicina, Losartán, Cáncer colorrectal

El cáncer puede ser definido como un conjunto de enfermedades caracterizado por un potencial ilimitado de proliferación celular, de invasión de células tumorales en tejidos cercanos y su diseminación en el cuerpo[1]. Una de las características más prominentes de estas células tumorales es su inestabilidad genómica. Para la progresión de la enfermedad, las células requieren de la pérdida de su maquinaria de integridad genética, debido a que, al tener la posibilidad de mutar continuamente adquieren la capacidad de adaptarse a los mecanismos de control del cuerpo[2], fenómeno conocido como plasticidad tumoral. Uno de los enfoques que se ha generado a nivel de investigación farmacológica para afrontar esta plasticidad es el desarrollo de terapias combinatorias, la cual se define como: emplear más de un tipo de tratamiento terapéutico contra el cáncer (ej. radioterapia + quimioterapia, terapia dirigida + radioterapia, etc) de manera simultánea en el paciente[3]. En este trabajo, se utilizó la terapia combinatoria entre el agente quimioterapéutico doxorrubicina junto con el medicamento no convencional Losartán. Se identificó una relación farmacológica tipo sinérgica durante todo el rango de concentraciones evaluadas. La terapia combinatoria Doxorrubicina-Losartán ejerce su acción inhibitoria principalmente activando el proceso de apoptosis, de igual manera suprime los procesos de migración celular e invasión en cultivos *in vitro*. Adicionalmente, la terapia combinatoria cooperativamente inhibió la vía canónica Akt/mTOR reduciendo la expresión de proteínas regulatorias como las proteínas quinasas B 1,2 y 3.

Referencias Bibliográficas

1. Hanahan, D.; Weinberg, R. A. Hallmarks of Cancer: The Next Generation. *Cell* **2011**, 144 (5), 646– 674. https://doi.org/10.1016/j.cell.2011.02.013

2. Jeggo, P. A.; Pearl, L. H.; Carr, A. M. DNA Repair, Genome Stability and Cancer: A Historical Perspective. *Nat. Rev. Cancer* **2016**, 16 (1), 35–42. https://doi.org/10.1038/nrc.2015.4

3. Bhatia, K.; Bhumika; Das, A. Combinatorial Drug Therapy in Cancer - New Insights. *Life Sci.* **2020**, *258*, 118134. https://doi.org/10.1016/j.lfs.2020.118134.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

ENERGÍAS RENOVABLES

X-225-O ANÁLISIS DE DEGRADACIÓN ÓPTICA DE PIGMENTOS NATURALES (SYZYGIUM PANICULATUM – BIXA ORELLAN) Y SINTÉTICOS (RUTENIO N719) PARA LA SENSIBILIZACIÓN DE CELDAS SOLARES DSSC

Análisis de Degradación Óptica de Pigmentos Naturales (*Syzygium paniculatum – Bixa orellan*) y Sintéticos (Rutenio N719) para la Sensibilización de Celdas Solares DSSC

Laura M. Pérez[1], Dayana A. Mateus[1], Alejandra Guadalupe Cruz Sanchez[1,2], Gerson-Dirceu López[1], Jorge A. Ramirez-Rincón[1*]

[1]Grupo de Fisicoquímica y Análisis Matemático, Facultad de Ciencias y Humanidades, Fundación Universidad de América, Avda. Circunvalar No. 20-53, Bogotá D.C., Colombia

[2]Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías (CUCEI), Universidad de Guadalajara, Blvd. Gral. Marcelino García Barragán 1421, Olímpica, 44430 Guadalajara, Jal., México

**Autor de correspondencia: jorge.ramirez@profesores.uamerica.edu.co*

Palabras clave: Espectroscopía óptica; Celdas solares; Rutenio-N719; *Syzygium paniculatum, Bixa orellana,* HPLC.

La crisis energética ha impuesto desafíos a la ciencia e ingeniería en la búsqueda de alternativas para su generación y consumo controlado a nivel mundial. Por ello, el estudio de materiales que permitan una conversión eficiente de fuentes renovables como la solar resultan de gran relevancia. Así, las celdas solares de tercera generación se han enfocado en la búsqueda de nuevos materiales para mejorar la eficiencia y reducir de los costos de producción. Estas celdas utilizan perovskitas y/o tintes como agente sensibilizador en dispositivos DSSC (Dye Sensitive Solar Cell) para la absorción de la energía, empleando tintes comerciales a base de rutenio (*N719 Solaronix*) alcanzando eficiencias hasta del 22%; sin embargo, debido a su alto costo y toxicidad, se continúan explorado otras alternativas para la sensibilización de este tipo de celdas. Por ello, en este trabajo se han evaluado extractos obtenidos a partir de *Syzygium paniculatum* y *Bixa orellana*, debido a su alto contenido de polifenoles y carotenoides, los cuales promueven la absorción de energía en el espectro solar y la posterior liberación de carga eléctrica La extracción de estos pigmentos se realizó mediante el método soxhlet con ciclohexano y maceración etanólica; evaluando posteriormente la sustitución total o parcial del tinte comercial de rutenio. Ambos pigmentos fueron expuestos a iluminación continua durante 196 horas para evaluar su degradación, incluyendo además el efecto del conservante butilhidroxitolueno en la estabilidad óptica y eléctrica de estos extractos. Los resultados de conductividad eléctrica demostraron aplicabilidad de ambos pigmentos sensibilizadores de celdas solares DSSC. Además, los análisis por HPLC en fase reversa evidenciaron la degradación de los componentes de ambos pigmentos a través del tiempo, al comparar los cambios en la absorción en las regiones UV-visible. La curva IV del dispositivo construido nos permitirá concluir cual es la mejor combinación de parámetros en la maximización de la potencia generada por la celda solar DSSC.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

X-330-O DESARROLLO DE MEMBRANAS PEM A BASE DE POLIETERETERCETONA SULFONADA (PEEK-S) PARA BATERÍAS ESTACIONARIAS DE FLUJO REDOX

Desarrollo de Membranas PEM a Base de Polieteretercetona Sulfonada (PEEK-S) para Baterías Estacionarias de Flujo Redox

Ricardo Serrato, Manuel A. Rosas, Jorge Gómez, Yazmin Agamez, Andrés Cabrera*

Laboratorio de Investigación en Combustibles y Energía – LICE, Universidad Nacional de Colombia
**ancabreraor@unal.edu.co*

Palabras Claves: Membranas; Celdas de Combustión; Baterías Estacionarias; Energías Alternativas

De cara a la transición energética, en diferentes zonas de Colombia se vienen realizado instalaciones de energía solar fotovoltaica. De ahí surge un nuevo desafío que es el almacenamiento económica- y ambientalmente sostenible de la energía generada. Baterías estacionarias de flujo redox emergen como una alternativa para dicho almacenamiento. La membrana, por las múltiples funciones que desempeña, es uno de los materiales más complejos y que repercuten en el costo final de las baterías [1]. En la actualidad las membranas se elaboran en tetrafluoroetileno sulfonado (Nafion), material que por su elevado costo y difícil disposición genera inconvenientes para la implementación de esta tecnología [2]. En este trabajo se desarrollaron materiales para la construcción de membranas de baterías estacionarias de flujo redox y celdas de combustión a base de PEEK (polieteretercetona) sulfonado. Este material se destaca por su alta resistencia mecánica, térmica y química. Adicionalmente, al no poseer flúor en su estructura, es un candidato ecológicamente atractivo [3].

El PEEK (500 mg, grado comercial) fue sulfonado por disolución (24 horas a temperatura ambiente) y posterior calentamiento a 50 °C (1-4 horas) en ácido sulfúrico concentrado (20 mL). Posteriormente se purificó por precipitación en agua con agitación vigorosa, centrifugación y lavados sucesivos hasta alcanzar la neutralidad. El PEEK-S fue secado a 60 °C por 24 horas y redisuelto en dimetil formamida. Las membranas fueron elaboradas por evaporación del solvente sobre una caja de Petri. Los materiales fueron caracterizados por FTIR, DSC y espectroscopía de impedancia. Así mismo se determinó la capacidad de absorción de agua y su capacidad de intercambio catiónico. Los materiales producidos mostraron buena conductividad y estabilidad térmica, así como una baja absorción de agua, lo cual los hace promisorios para uso como membranas PEM. Sin embargo, presentaron también baja resistencia mecánica y alta fragilidad y baja solubilidad con el aumento del grado de sulfonación.

Bibliografía:

[1] International Electrotechnical Commission. Electrical Energy Storage. White Paper. December (2011).
[2] Shunli Chang, Jiaye Ye, Wei Zhou, Chun Wu, Mei Ding, Yong Long, Yuanhang Cheng, Chuankun Jia. A low-cost SPEEK-K type membrane for neutral aqueous zinc-iron redox flow battery. Sct (2018), https://doi.org/10.1016/ j.surfcoat.2018.11.028.
[3] Hamada et. al. Poly(ether ether ketone) (PEEK)-based graft-type polymer electrolyte membranes having high crystallinity for high conducting and mechanical properties under various humidified conditions. J. Mater. Chem. A, (2015), 3, 20983.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

X-349-O ESTUDIO DE PARÁMETROS CRÍTICOS EN EL PROCESO DE ENSAMBLAJE Y CARACTERIZACIÓN SOBRE EL RENDIMIENTO DE CELDAS SOLARES SENSIBILIZADAS POR PIGMENTOS

Estudio de Parámetros Críticos en el Proceso de Ensamblaje y Caracterización sobre el Rendimiento de Celdas Solares Sensibilizadas por Pigmentos

Juan P. Rojas[a*], Luisa N. Córdoba[a], Mario Millán[b], John S. Betancourt[a,c] , Lorena Marín[a,c], Katherine Gross[a,c], Alejandro Ortiz[d*]

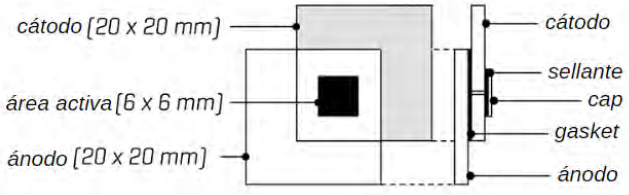
[a]Grupo de Investigación en Películas Delgadas y Nanoestructuras, Universidad del Valle, Colombia
[b]Instituto de Energías Renovables, Universidad Nacional Autónoma de México, México
[c]Centro de Excelencia en Nuevos Materiales (CENM), Universidad del Valle, Cali A.A. 25360, Colombia
[d]Grupo de Investigación en Compuestos Heterocíclicos, Universidad del Valle, Colombia
**Autores de correspondencia: alejandro.ortiz@correounivalle.edu.co; juan.rojas.gil@correounivalle.edu.co*

Palabras Clave: DSSC; Solaronix; Celdas solares; pigmentos; eficiencia

Las celdas solares sensibilizadas por pigmentos (DSSC) han sido estudiadas ampliamente durante las últimas décadas debido a sus bajos costos de producción, la poca toxicidad de sus elementos y su facilidad para producirlas. Para este tipo de celdas se cuenta con cuatro parámetros clave: el electrodo de trabajo, el sensibilizante o colorante, el electrolito y el contra-electrodo. Las investigaciones en los últimos tiempos se han visto enfocadas en mejorar cada uno de estos componentes. Pero otro factor importante para poder mejorar los resultados de eficiencia de las DSSC es la compatibilidad entre las partes descritas [1]. Por esta razón, este trabajo de investigación se enfoca en el estudio de los parámetros críticos en el proceso de montaje y caracterización de una celda solar sensibilizada por pigmentos (Figura 01) para obtener el mejor rendimiento posible.

Uno de los parámetros críticos en el ensamblaje de las DSSC es el sellado, debido a que el electrolito utilizado es líquido y se debe evitar cualquier fuga o evaporación del mismo. En este trabajo, hemos explorado diferentes enfoques para mejorar este proceso. En cuanto a la caracterización fotovoltaica, se ha validado que una configuración que incluya 30 segundos de pre-iluminación, 241 puntos de barrido y 40 microsegundos entre cada punto, ha aumentado significativamente todos los parámetros fotovoltaicos. Esto ha permitido obtener hasta el momento una eficiencia alrededor del 4.1% y un factor de llenado de 0.756, utilizando el kit comercial de DSSC distribuido por la marca Solaronix.

Figura 01. Esquema de los componentes de la celda solar. Adaptado de [2].



[1] Sharma, K., Sharma, V. & Sharma, S.S. Dye-Sensitized Solar Cells: Fundamentals and Current Status. *Nanoscale Res Lett* **13**, 381 (2018). https://doi-org.bd.univalle.edu.co/10.1186/s11671-018-2760-6
[2] https://shop.solaronix.com/test-cell-kit.html

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

X-359-O ***SÍNTESIS ELECTROQUÍMICA DE PELÍCULAS DE POLIPIRROL/LA(OH)3 Y ESTUDIO DE SUS PROPIEDADES COMO CAPACITOR ELECTROQUÍMICO***

Síntesis electroquímica de películas de Polipirrol/La(OH)$_3$ y estudio de sus propiedades como capacitor electroquímico

Cristian Eduardo Cortés Aguillón[*a], **María Teresa Cortés**[a]

[a] *Depto. de Química., Universidad de los Andes, Cra 1 Nº 18A – 12, Bogotá, 111711, Colombia*
* *Ce.cortesa@uniandes.edu.co*

Palabras claves: Materiales; Energía; electroquímica; pseudocapacitores; polímeros conductores

El uso de energías alternativas basadas en fuentes intermitentes requiere dispositivos de almacenamiento para garantizar un suministro continuo. Los capacitores electroquímicos (CE) son una opción destacada debido a sus propiedades intermedias entre baterías y condensadores convencionales, con altos valores de potencia y energía. Sin embargo, sus densidades de energía son inferiores a las de las baterías, lo que ha llevado a investigaciones en busca de optimizar su desempeño.

En este contexto, los materiales híbridos basados en recubrimientos de polímeros conductores han surgido como alternativas prometedoras para el desarrollo de CE. Estos materiales ofrecen capacitancias significativamente superiores a los materiales carbonosos. No obstante, una desventaja importante es su baja estabilidad, ya que tienden a degradarse rápidamente en los primeros cientos de ciclos de carga/descarga. Por ende, es crucial obtener materiales híbridos que mejoren la estabilidad sin comprometer sus propiedades capacitivas.

En este estudio se presenta la síntesis electroquímica de recubrimientos polipirrol (PPy) / La(OH)$_3$ sobre electrodos de carbono vítreo y la evaluación de sus propiedades de capacitancia. Se realizó una síntesis electroquímica donde se utilizó una señal eléctrica por pulsos galvanostáticos con el fin de obtener un polímero de alta área superficial. Además, se sintetizó el PPy con dos aniones diferentes (PSS^-: poliestireno sulfonato, y ClO_4^-). La caracterización electroquímica (voltamperometría cíclica y carga/descarga galvanostática en KCl 0.1 M) mostró que los dopantes producen capacitancias similares pero el PSS lleva a una mayor estabilidad durante los ciclos de carga/descarga del material. Por último, se modificó el polímero con hidróxido de lantano (PPy-PSS / La(OH)$_3$), y se evaluó su efecto sobre las propiedades de capacitancia encontrando una mejora en su ciclo de vida del 17 % en comparación con PPy/PSS. La caracterización morfológica de los polímeros por microscopía electrónica de barrido mostró la formación de estructuras granulares de un tamaño de partícula pequeño, lo que indica gran área superficial.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA

XII-19-O ***Implementación De Una Estrategia De Aprendizaje Guiada Por Preguntas Y Evaluada Por Medio De Un Cuaderno Electrónico Para Los Laboratorios De Fisicoquímica De La Escuela De Química.***

Implementación De Una Estrategia De Aprendizaje Guiada Por Preguntas Y Evaluada Por Medio De Un Cuaderno Electrónico Para Los Laboratorios De Fisicoquímica De La Escuela De Química.

Daniela P Rueda [a], Fabian A Ríos [b*]

[a] *Universidad Industrial de Santander, Colombia*
[b] *GIC, Universidad Industrial de Santander, Colombia*
** Autor de correspondencia: fabianra@uis.edu.co*

Palabras Claves: POGIL- PCL process oriented guided inquiry learning, Cuaderno de laboratorio Wiki, laboratorio de fisicoquímica, pensamiento crítico

Esta investigación tiene como objetivo implementar el modelo POGIL-PCL, asistido por un ELN basado en un software wiki.js, para estudiantes de Química adscritos al curso de laboratorio de fisicoquímica II de la Universidad Industrial de Santander. El trabajo se realizó en tres fases. En la primera, se diseñó el Notebook Lab UIS como cuaderno electrónico de laboratorio de software wiki.js. En la segunda, se implementaron los tres montajes experimentales para medir capacidad calorífica molar de un gas: medición directa (método comercial Phywe), expansión adiabática de gases y mediciones de velocidad del sonido (tubo de Kundt). Finalmente, se desarrolló el taller de laboratorio "Capacidad calorífica molar de un gas" basado en los lineamientos POGIL-PCL. La herramienta Wiki.Js se empleó para la recolección de datos y el marco LEPO para analizar las interacciones entre el estudiante, el instructor, la herramienta y el proceso de aprendizaje. Los resultados indicaron: (1) La adaptación de Wiki.Js como ELN fomenta la alfabetización digital (Ver figura 1) y se puede emplear en un entorno de aprendizaje; (2) El taller POGIL-PCL, para la medición de la capacidad calorífica molar de un gas, permite la construcción de conceptos de capacidad calorífica molar de manera secuencial a través del desarrollo de tres ciclos. Durante los experimentos, se obtuvieron resultados satisfactorios de γ, Cv y Cp por parte de los estudiantes, a través de los montajes experimentales de expansión adiabática y velocidad del sonido (tubo de Kundt); (3) En el desarrollo del taller los estudiantes obtuviron conclusiones correctas desde sus experiencias y justificaron los resultados obtenidos con argumentos científicos. Igualmente, el 73.3% de los estudiantes está en total acuerdo en que el taller estimula el pensamiento crítico; (4) El instructor puede realizar seguimiento o análisis de contenido del historial de la Wiki.Js y evaluar la actividad de los estudiantes durante el desarrollo de cada ciclo dentro y fuera del laboratorio lo cual facilitó el trabajo colaborativo y fomentó la participación activa de los estudiantes.

Con estos resultados se concluye que la herramienta de enseñanza implementada durante el presente trabajo potencia el pensamiento crítico y el aprendizaje activo, constructivo y colaborativo de los estudiantes. Este estudio demuestra que el entorno Wiki.Js facilita la organización y recolección de datos experimentales.

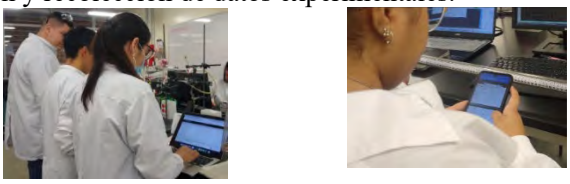


Figura 1. *Manipulación del Notebook Lab UIS desde diferentes equipos electrónicos*
Nota: La imagen muestra a estudiantes interactuando con el Notebook Lab UIS desde un celular y/o computador personal. (Fuente: Autor del proyecto).

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Tiflotecnología aplicada a la enseñanza de la química para estudiantes con discapacidad visual

Edith R. Montalvo Sánchez [a,b], Juan R. Ochoa Morales [b], Julio J. Sánchez Hernández [b], Aarón Rodríguez López [b], Evangelina Zepeda García [b], Julio C. González Olvera [b], Flora E. Mercader Trejo[b]*

[a] *Centro de Estudios Tecnológicos Industrial y de Servicio No.16. SEP. México.*
[b] *Universidad Politécnica de Santa Rosa Jáuregui, México.*

**Autor de correspondencia: fmercader@upsrj.edu.mx*

Palabras Claves: Palabras Claves: Material Didáctico; Discapacidad visual; Química.

Los estudiantes con discapacidad visual representan un grupo vulnerable de la sociedad, en donde existe la necesidad de implementar medidas especiales para promover la inclusión y acceso a la educación de calidad con los materiales favorables para adquirir los conocimientos y habilidades para desarrollarse en la vida diaria. (DOF/PSE. 2020).

En este contexto se presenta la Tiflotecnología cómo una valiosa herramienta para el acceso a la información de personas ciegas, de esta manera ha sido posible el diseño y elaboración de material didáctico en 3D con escritura en braille y relieve en un diseño universal. Así como una estrategia didáctica que permite vincular los conocimientos de la química con la vida diaria, facilitando la realización de las actividades de aprendizaje, así como la integración de estudiantes con discapacidad visual con sus demás compañeros de clase en educación media superior.
La metodología de investigación es de enfoque mixto descriptivo cualitativo y cuantitativo. Teniendo como herramienta para obtención de información a la entrevista que permitió hacer el análisis a partir de las respuestas de los estudiantes, para describir las características necesarias en el diseño y elaboración del material didáctico empleando la manufactura aditiva para la impresión del material didáctico.

Cómo resultado se presenta el material didáctico en 3D con braille, además de una estrategia didáctica diseñada para su aplicación. Se concluye que la metodología utilizada para el desarrollo, elaboración del material y su aplicación facilitan el conocimiento de química en estudiantes del nivel de educación media superior.

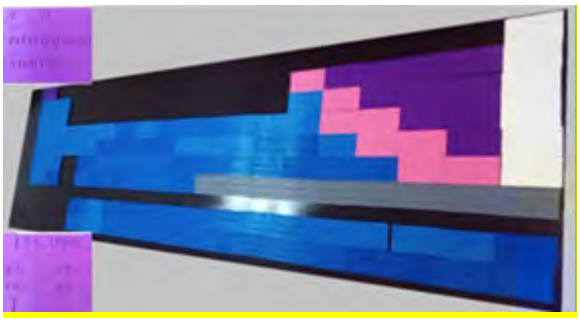


Figura 1. Material didáctico consistente en la tabla periódica completa impresa en 3D con escritura en braille y relieve.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Potenciómetro Parlante para Estudiantes con Discapacidad Visual

Flora E. Mercader Trejo [a*], Aarón Rodríguez López[a], Fernando Alexis Villanueva Aguillón[a], Juan M. Peña Aguilar[a]

[a] *Universidad Politécnica de Santa Rosa Jáuregui, México.*

**Autor de correspondencia: fmercader@upsrj.edu.mx*

Palabras Claves: Potenciómetro; pH, dispositivo embebido, Discapacidad visual, enseñanza de la química

La enseñanza de las ciencias fomenta la comprensión y el interés por los principios científicos y favorece el pensamiento crítico y la resolución de problemas. Es primordial considerar las diferencias individuales de los estudiantes y adaptar la enseñanza de las ciencias para satisfacer sus necesidades. Esto incluye el uso de enfoques diferenciados, recursos adicionales para estudiantes con discapacidades o adaptaciones para aquellos con estilos de aprendizaje particulares. Las personas con discapacidad representan uno de los grupos minoritarios que deben incluirse en la educación a todos los niveles, siendo crucial el desarrollo y aplicación de materiales de aprendizaje con diseño universal.

El potenciómetro parlante (Figura 1) fue diseñado y desarrollado como material didáctico para fomentar la inclusión de estudiantes con discapacidad visual en las prácticas que se realizan en el laboratorio de química de tal forma que puedan participar y aprender de manera efectiva al mismo tiempo que sus compañeros con visión. Se construyó un dispositivo embebido que controla un sistema de medición de pH mediante un electrodo de bajo costo que proporciona retroalimentación a las personas ciegas mediante la reproducción del audio de la lectura de pH de la disolución evaluada. El sistema se desarrolló utilizando componentes fáciles de adquirir, implementar y mantener, pero sobre todo durables y de bajo costo como una pantalla LCD, una tarjeta SD y un módulo de audio con amplificador. El código está diseñado para una configuración específica donde se mide el pH de una sustancia dando retroalimentación de audio y visual en función del valor del pH. El procedimiento para preparar el electrodo hasta la lectura y limpieza se realiza mediante voz, permitiendo que el módulo sea amigable para el uso de personas con discapacidad visual.

La funcionalidad del potenciómetro fue validada midiendo materiales de referencia de pH y fue operado por estudiantes con discapacidad visual para evaluar su funcionabilidad, facilidad de uso y seguridad dentro del laboratorio. Este prototipo es la base para continuar con la línea de investigación “Evaluación e implementación de estrategias didácticas en enseñanza de las ciencias” particularmente para la inclusión educativa en química de personas con alguna discapacidad.

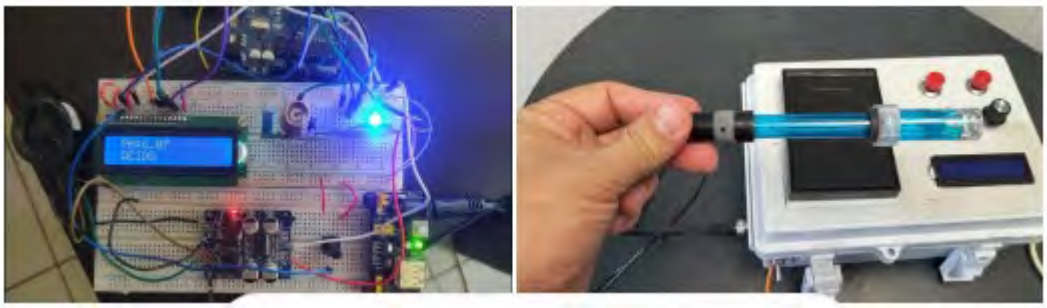


Figura 1. Potenciómetro parlante diseñado para la enseñanza de la química a estudiantes con discapacidad visual.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

7-FeSTiVAl de Química ACS 2023 del Capitulo Bogotá

Manuel F. Molina [a*], **José G. Carriazo** [b], **Rodrigo Rodriguez** [c]

[a] mfmolinac@unal.edu.co, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Grupo de investigación en Enseñanza de la química. Carrera 30 #45-03, Ciudad Universitaria, Edificio 451, Bogotá, código postal 111321-Colombia.

[b] jcarriazog@unal.edu.co, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Grupo de investigación en Enseñanza de la química. Carrera 30 #45-03, Ciudad Universitaria, Edificio 451, Bogotá, código postal 111321-Colombia.

[c] rrodriguez@pedagogica.edu.co, Universidad Pedagógica Nacional. Facultad de Ciencias, Departamento de Química. Grupo de Investigación Didáctica y sus Ciencias. Calle 72 No. 11-86, Bogotá. Código Postal: 110221-Colombia.

*Autor de correspondência: mfmolinac@unal.edu.co

Palabras Clave: Festival; Química; Divulgación; Actitudes; Ciencia.

Resumen

Los Festivales de Química han sido promovidos por la ACS (American Chemical Society) como una forma de divulgar la Química y de crear espacios de enseñanza informales fuera del aula. La primera versión se presento en 2005 en Puerto Rico y de ahí en adelante se han difundido a nivel internacional. De esta manera, en el Capítulo Bogotá de la ACS se han realizado desde 2017 los Festivales, y para el XIX Congreso Colombiano de Química 2023 se presenta una versión sencilla del 7-Festival de Química. Esta consiste en la realización de una serie de demostraciones químicas que utilizan materiales y reactivos de muy baja peligrosidad que impactan al público para generar en este aprendizaje significativo de conceptos científicos y de promoción de actitudes positivas hacia la ciencia. La presentación de las demostraciones sigue un protocolo de seguridad para que sean seguras, amenas y enseñen conceptos químicos. Con esto, los participantes del Festival aumentan su motivación hacia el aprendizaje de la química, logran un adecuado entendimiento de la ciencia y una mejora en las actitudes hacia esta. La promoción de los Festivales ante público novato deja una impresión permanente de la relevancia de la química; y ante público relacionado con la enseñanza y la profesión química deja un ejemplo de formato a imitar en la divulgación y aprendizaje significativo de la química.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

FISICOQUÍMICA

VIII-24-O ***MEJORADA EFICIENCIA Y PROPIEDADES FOTOVOLTAICAS DE CELDAS SOLARES INVERTIDAS DE PEROVSKITA A TRAVÉS DE LA CAPA TRANSPORTADORA HUECOS DE NIOX DOPADA CON IN POR DEPOSICIÓN ELECTROQUÍMICA***

Mejorada eficiencia y propiedades fotovoltaicas de celdas solares invertidas de perovskita a través de la capa transportadora huecos de NiOx dopada con In por deposición electroquímica

Martín González-Hernández[1]*, Eider Ansisar Erazo[1], Pablo Ortiz[2], María T. Cortés[1]

[1] Department of Chemistry, Universidad de los Andes, Bogotá 111711, Colombia
[2] Department of Chemical Engineering, Universidad de los Andes, Bogotá 111711, Colombia
m.gonzalezhernandez@uniandes.edu.co

Palabras Clave: Celdas solares invertidas (IPSC), Eficiencia de conversión energética (PCE), capa conductora de huecos (HTL).

Las celdas solares invertidas de perovskita (IPSCs) han tenido un aumento notable en la eficiencia de conversión de energía (PCE) durante los últimos años, llegando al 25% y teniendo un alcance teórico del 34%. Por lo tanto, se ha convertido en uno de los dispositivos más relevantes para complementar la tecnología solar basada en Si. Una de las estrategias para para lograr aumentos significativos en IPSCs de alto rendimiento es el uso de una película de NiOx como capa transportadora de huecos (HTL). Este material exhibe una alta movilidad de huecos, buena alineación del nivel de energía y compatibilidad con la arquitectura invertida. En este trabajo se investigó por primera vez la electrodeposición de NiOx dopado con indio (NiOx:In) y se evaluó como HTL en IPSC comparado con NiOx puro. Se encontró que el dopaje con In en la capa de NiOx induce cambios en la morfología de la capa de HTL y PVK, produciendo una superficie más uniforme, lo que conduce a una mejor compatibilidad interfacial HTL/PVK en el transporte de carga.

Al evaluar diferentes composiciones de indio en la solución de electrosíntesis de NiOx:In, se observó que la relación atómica NiOxIn 0,5% corresponde al dispositivo campeón en PCE, 20,06% con una Voc de 1,11 V y FF 78,19%. La celda solar con NiOx puro presentó un PCE campeón de 17,92 %, Voc de 1,06 V y FF de 70,18 %. Estos resultados están de acuerdo con los resultados promedio para 20 celdas en cada variación. Por lo tanto, este trabajo confirma que el dopaje de NiOx con In es una estrategia prometedora para mejorar el transporte de huecos en IPSCs, debido al mayor comportamiento por la compatibilidad en la región de la interfaz NiOx:In/PVK, lo que minimiza las pérdidas del portador y mejora el transporte de carga por las capas de NiOx:In y PVK, como se ha reportado con otros metales[1,2].

REFERENCIAS:

(1) Teo, S.; Guo, Z.; Xu, Z.; Zhang, C.; Kamata, Y.; Hayase, S. The Role of Lanthanum in a Nickel Oxide-Based Inverted Perovskite Solar Cell for Efficiency and Stability Improvement. 2019, 0196, 518–526. https://doi.org/10.1002/cssc.201802231.
(2) Ma, F.; Zhao, Y.; Li, J.; Zhang, X.; Gu, H.; You, J. Nickel Oxide for Inverted Structure Perovskite Solar Cells. J. Energy Chem. 2021, 52, 393–411. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jechem.2020.04.027.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Fisicoquímica del Interior de la Tierra: Avances en Colombia

Gustavo Garzón[a,b*], Arturo Argüelles[b,c], Luisa F Meza[a,b]

[a] *Servicio Geológico Colombiano SGC, Dirección Técnica de Laboratorios, Cali y Popayán, Colombia*
[b] *Centro de Aplicaciones Fisicoquímicas en el Entorno, Grupo de Investigación FISQUIM, Cali, Valle*
[c] *Universidad del Valle, Departamento de Física, Cali, Colombia*
** Autor de correspondencia: ggarzon@sgc.gov.co*

Palabras Claves: Gases; Termodinámica; Fluidos; Tierra; Sistema Solar.

Se presentan resultados de las investigaciones que desde el grupo FISQUIM (COL21908) se vienen adelantando en varios departamentos del territorio colombiano, mostrando de manera introductoria aspectos geodinámicos, para enfocar la ponencia en las investigaciones espeleológicas de los últimos siete años. Se incluye una descripción de las redes internacionales NOVAC (Network for Observation of Volcanic and Atmospheric Change) y DECADE (Deep Earth Carbon Degassing) en las cuales se ha venido coparticipando.

Se muestran interpretaciones dinámicas de los fluidos medidos al interior de cuevas, cavernas, minas en explotación y minas abandonadas, destacando contenidos máximos de los gases CO_2 (2100 ppm), H_2S (1,2 %), CH_4 (4,9 %) y Radón (28 kBq/m^3), con algunas consideraciones isotópicas. Para el gas radiactivo radón, se muestran ejemplos de ambientes espeleológicos donde se han logrado encontrar niveles cancerígenos del isótopo ^{222}Rn y en algunos casos también se ha cuantificado el isótopo ^{220}Rn, este último conocido como Torón. En representaciones 3D se explica que en un mismo ambiente subterráneo y debido a los internos gradientes de presión y a factores estructurales y composicionales de las rocas y minerales en el subsuelo, se pueden formar zonas de acumulación de gases tóxicos, explosivos, asfixiantes y/o radiactivos, como también zonas con importantes flujos de vientos. Es destacable el hecho que en todos los ecosistemas espeleológicos estudiados, las temperaturas del aire interno son relativamente constantes y de bienestar para los seres vivos.

Concluyendo, se presentarán ejemplos de usos que en varios países dan a sus sistemas subterráneos para tratamientos terapéuticos, turismo, deportivo, científico, como depósitos de alimentos, para el añejamiento de los vinos y muchos otros usos más. Recordando que en territorio colombiano es muy poco lo que se conoce de nuestro patrimonio espeleológico, se indicará que se gestionó en el Legislativo colombiano la Ley 2237 de 2022 para la protección del patrimonio espeleológico colombiano, el cual se encuentra en el Ejecutivo colombiano en la etapa de regulación y formulación de una política pública integral, donde se espera la importante participación de los investigadores, grupos e instituciones de las regiones colombianas.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Efecto del pH en la Actividad Antioxidante del Ácido Úrico sobre el Triptófano

Santiago González [a]*, Leonardo Muñoz-Rugeles [a], Enrique Mejía-Ospino [a]

[a] Laboratorio de Espectroscopia Atómica y Molecular (LEAM), Universidad Industrial de Santander, Colombia
* Autor de correspondencia: sire.sgp@hotmail.com

Palabras Clave: Triptófano; Ácido úrico; Actividad antioxidante; Fotoxidación; HPLC/FLD

Este estudio evaluó la acción antioxidante del ácido úrico sobre el triptófano cuando este fue sometido a un proceso de fotooxidación a diferentes niveles de pH. Para la medición indirecta de este fenómeno se empleó un equipo de HPLC/FLD, por ello, se realizaron curvas de calibración de triptófano a diferentes pH (4, 5 y 6), todas en rangos de concentración similar (entre 0,5ppm y 10ppm) usando un patrón primario de triptófano. Seguido de ello, se tomaron 2 soluciones de triptófano de concentración conocida por cada pH, a una de ellas se le agrego oxidante ($Na_2S_2O_8$) y a la otra se le agrego tanto oxidante como ácido úrico (antioxidante) a concentraciones fijas. Finalmente, se expusieron todos los sistemas a fotoxidación UV con lámpara de mercurio durante un tiempo fijo y se midió la concentración final de triptófano obtenida en cada caso.

Los resultados obtenidos permitieron observar la variación de la actividad antioxidante del ácido úrico sobre el triptófano a diferentes pH, lo que, a su vez, permitió indagar en los mecanismos de reacción de radicales libres de triptófano en función del pH usando literatura previamente reportada.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VIII-27-O ***EVALUACIÓN DE LA EFICIENCIA FOTOELECTROQUÍMICA DE FOTOÁNODOS DE CEO2 PARA LA DEGRADACIÓN DE CIPROFLOXACINO***

Evaluación de la eficiencia fotoelectroquímica de fotoánodos de CeO2 para la degradación de ciprofloxacino

Alberto E. Molina Lozano[a*], María T. Cortés Montañez[b], Marcos R. De Vanconcelos Lanza[c]

[a]Laboratorio de electroquímica y materiales poliméricos, Universidad de Los Andes, Colombia
[b]Laboratorio de electroquímica y materiales poliméricos, Universidad de Los Andes, Colombia
[c]Grupo de Electroquímica y Procesos Ambientales(GPEA), Brasil

**autor de correspondencia: ae.molina@uniandes.edu.co*

Palabras claves: dióxido de cerio; fotoelectroquímica; degradación; eficiencia; especies reactivas de oxigeno (ROS); scavengers

En este trabajo se presentan los resultados del estudio fotoelectroquímico de la degradación del antibiótico ciprofloxacino usando fotoánodos de dióxido de cerio (CeO_2). La técnica utilizada para la fotodegradación fue la cronoamperometría, aplicando un potencial constante durante un tiempo de degradación de 2 horas en una celda fotoelectroquímica de 3 electrodos. El CeO_2 fue electrodepositado sobre un vidrio conductor (FTO) a partir de una solución acuosa de $CeCl_3$ 25 mM y $NaNO_3$ 50 Mm a pH 4.5. La electrodeposicion fue por el metodo de generacion de base por aplicación de un potencial catódico de -1.2 V vs Ag/AgCl. Como referencia y contraelectrodo se utilizaron el electrodo de Ag/AgCl y platino, respectivamente. Se utilizó cromatografía liquida de alta resolución (HPLC) con un detector de arreglo de diodos (UV-Vis) para la detección de la molécula antes y después de la fotodegradación. Se probaron tres fuentes de radiación UV para la excitación de los fotoánodos de CeO_2 y se determinaron las eficiencias de la degradación del ciprofloxacino. Manteniendo la energía de excitación fija, se estudiaron el efecto del pH, el potencial de degradación y la concentración del contaminante. Se encontró que un potencial anódico de +2.0 V, un pH de 9.0 y una concentración de ciprofloxacino de 10 ppm son las condiciones a las que el CeO_2 presenta la mayor eficiencia de degradación, la cual fue del 60%. Se determinaron las especies reactivas de oxígeno que participan en la degradación utilizando isopropanol, oxalato de amonio y p-benzoquinona para la detección de hidroxilos, huecos y peróxidos, respectivamente. Se encontró que los hidroxilos y los huecos son las especies oxidantes predominantes durante la degradación del antibiótico.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Fabricación de Plataformas de Óxidos Semiconductores Nanoestructurados a partir de Películas de Cobre

María C. Pérez Ortiz [a]*, Luis A. Rodríguez [b,c], Lorena Marín [a,b,c]*

a. *Grupo de Película Delgadas, Departamento de Física, Universidad del Valle, Cali A.A. 25360, Colombia*
b. *Grupo de Transiciones de Fase y Materiales Funcionales, Departamento de Física, Universidad del Valle, Cali A.A. 25360, Colombia*
c. *Centro de Excelencia en Nuevos Materiales (CENM), Universidad del Valle, Cali A.A. 25360, Colombia*

** maria.perez.ortiz@correounivalle.edu.co*
** marin.lorena@correounivalle.edu.co*

Palabras Claves: Nanoestructuras de óxidos; CuO; Cu_2O; óxidos de cobre;

Las propiedades físicas de los materiales óxidos semiconductores nanoestructurados de cobre son utilizadas en diversas aplicaciones tecnológicas tales como superconductores de alta temperatura crítica, sensores de gas, fotocatálisis, antimicrobianos, etc. [1] Se ha observado que la temperatura induce variaciones en la composición y morfología de estos materiales. En este trabajo se reporta la fabricación de nanoestructuras híbridas de óxidos de cobre y su dependencia con el tiempo de recocido, utilizando estándares tecnológicos accesibles y de bajo costo. Inicialmente, con el método de evaporación térmica se crecieron películas de cobre de 400 nm de espesor depositadas en un sustrato de silicio, que posteriormente se sometieron a tratamientos térmicos a 400 °C por 5, 15 y 30 minutos en atmosfera de aire. Para estudiar los efectos del tiempo de recocido en la morfología nanoestructurada, se tomaron imágenes mediante microscopía de fuerza atómica (AFM) y electrónica de barrido (SEM) (ver figura 1).

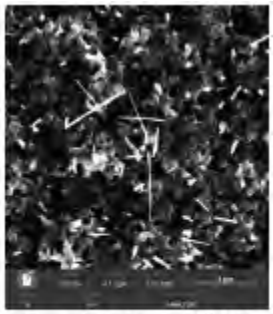


Figura 1. Imágenes SEM de muestras con recocido a 400 °C y tiempo de 30 minutos.

Del estudio se encontró una relación directa entre el crecimiento de las nanoestructuras y el tiempo de recocido, que al incrementarse aumentaba la densidad de los nanohilos sobre la superficie. La evolución de la transformación del cobre a óxidos se estudió por difracción de rayos X, espectroscopía UV-Vis y RAMAN. Los resultados preliminares muestran que hay una coexistencia de fases, composiciones tales como la cuprita y la tenorita, siendo esta última la más predominante con el aumento del tiempo de recocido. Estas características permiten tener nanoestructuras hibridas, cuya respuesta óptica está directamente relacionada con la duración del tratamiento térmico. Se observó un incremento de la capacidad de absorber luz visible y se encontraron anchos de banda dentro de los rangos de valores adecuados para óxidos metálicos semiconductores.Principio del formulario

Finalmente, el proceso aplicado genera propiedades estructurales beneficiosas que incrementan de manera significativa el área superficial disponible. Esta característica, en conjunto con las propiedades ópticas y estructurales inherentes a los óxidos semiconductores de cobre, establece que el método tiene el potencial de ser una opción prometedora para la fabricación de plataformas funcionales para la remediación de contaminantes emergentes en agua.

[1] Singh J, Kaur G, Rawat M. A Brief Review on Synthesis and Characterization of Copper Oxide Nanoparticles and its Applications. J Bioelectron Nanotechnol 2016;1(1): 9

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Descripción Microcinética de la Reacción de Electro-oxidación de Ácido Fórmico

Alfredo Calderón-Cárdenas [a,*], **Enrique A. Paredes-Salazar** [a,b], **Hamilton Varela** [b]

[a] *Grupo de Investigación en Fisicoquímica Básica y Aplicada, Universidad de Nariño, Colombia*
[b] *Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, Brasil*
* *Autor de correspondencia: alfredocalderon@udenar.edu.co*

Palabras Claves: Microcinética; Electrocatálisis; Electro-oxidación; Ácido fórmico.

La electro-oxidación de compuestos orgánicos tiene un importante protagonismo en la transición energética hacia un escenario sostenible debido a su aplicación en celdas de combustible de baja temperatura. En este panorama, comprender la correlación entre las propiedades del sistema electroquímico a nivel molecular y las propiedades a escala mesoscópica es fundamental para diseñar materiales con alta actividad catalítica. Tal correlación es posible a través de un análisis microcinético, que consiste en la comprensión de la velocidad de reacción global a partir de la contribución de cada etapa de reacción. En el caso específico de la reacción de electro-oxidación de ácido fórmico (FAEOR) sobre platino, diferentes propuestas al mecanismo de reacción se encuentran en la literatura, las cuales son constantemente reevaluadas a la luz de nuevas observaciones experimentales y abordajes teórico-computaciones, siendo aún un tema de debate entre la comunidad científica.[1] A fin de integrar los diferentes niveles de estudio del sistema electrocatalítico, proponemos un modelo microcinético para la FAEOR sobre platino policristalino en medio ácido (ver Figura 1) considerando algunas modificaciones a los mecanismos propuestos en la literatura.

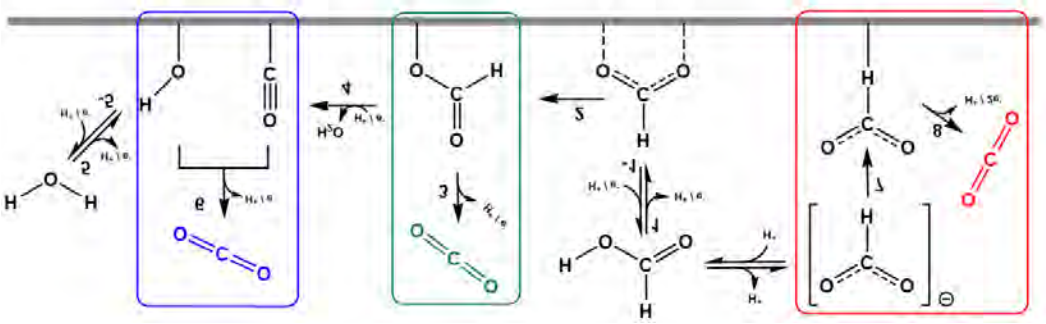


Figura 1. Mecanismo propuesto para la reacción de electro-oxidación de ácido fórmico.

El modelo permitió simular numéricamente los resultados experimentales obtenidos mediante técnicas electroquímicas convencionales, además de experimentos galvanostáticos bajo régimen oscilatorio. En este sentido, destacamos el uso de la dinámica oscilatoria como una poderosa herramienta para obtener información detallada del sistema dada la sensibilidad a los factores que afectan la velocidad de los pasos elementales de reacción.[2] A partir del modelo microcinético se analizó del efecto de la temperatura sobre las velocidades de reacción permitiendo estimar la energía de activación de cada paso en función del potencial del electrodo, mostrando que la ruta directa (recuadro rojo de la Figura 1) es cinéticamente más favorecida para la formación de CO_2 con un energía de activación de 91 kJ mol^{-1} a 0.40 V vs RHE y 72 kJ mol^{-1} a 0.80 V vs RHE.[3]

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VIII-457-O ***ESTUDIO DE LA CINÉTICA DE ADSORCIÓN PARA BRIJ58 EN LA INTERFASE VAPOR SATURADO-DISOLUCIÓN ACUOSA A 298.15 K POR MÉTODO CUASIESTÁTICO DE VOLUMEN DE GOTA.***

Estudio de la cinética de adsorción para Brij58 en la interfase vapor saturado-disolución acuosa a 298.15 K por método cuasiestático de volumen de gota.

Jaime A. López [a], Julio A. Clavijo* [a].

a Depto de Química, Universidad Nacional de Colombia sede Bogotá, Colombia
**Autor de correspondencia: jaclavijop@unal.edu.co*

Palabras Claves: Tensoactivos no iónicos; etoxilado, CMC, adsorción, tensión superficial.

Los tensoactivos no iónicos etoxilados, como el Brij58, son ampliamente usados en la industria cosmética, por ejemplo, en formulaciones de diversos productos sanitarios, y en diversos contextos biológicos, por lo que sus propiedades fisicoquímicas en disolución acuosa son un área de investigación de constante interés. En el presente estudio se evalúan las etapas difusivas del analito, en la capa límite de la interfase, a través del modelo de Tordai y Ward, y se analizan los fenómenos superficiales antes y después de la concentración micelar crítica (CMC) a partir de medidas de tensión superficial por volumen de gota realizadas por etapas cuasiestáticas, para tiempos de adsorción de 10 a 60 minutos a 298.15 K +- 0.05 K, y se obtuvieron los perfiles de adsorción para varias concentraciones de Brij58 entre 0 y 80 μm. Los perfiles de adsorción de las soluciones entorno al CMC reportado en literatura, muestran un cambio de curvatura, lo que concuerda con la saturación de la superficie, y los valores de coeficientes de difusión alcanzan un mínimo en el CMC.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VIII-517-O ***EFECTO DEL AUMENTO DE CADENA SOBRE LAS PROPIEDADES VOLUMÉTRICAS DE RESORCIN[4]ARENOS EN SOLUCIÓN.***

Efecto del Aumento de Cadena Sobre las Propiedades Volumétricas de Resorcin[4]arenos en Solución

Edgar F. Vargas

Laboratorio de Termodinámica de Soluciones, Departamento de Química, Universidad de los Andes, Bogotá D.C., Colombia

edvargas@uniandes.edu.co

Los resorcinarenos son macrociclos de gran importancia en química supramolecular debido a su versatilidad, la cual esta relacionada con sus propiedades estructurales. En esta contribución se relacionaron las propiedades volumétricas de cuatro resorcinarenos con el aumento sistemático de la cadena hidrocarbonada localizada en el anillo inferior de los macrociclos. La aditividad de grupos $-CH_3$ y $-CH_2$ en solución ha sido evidenciada en solutos modelo, sales de tetraalquilamonio por ejemplo, donde existe una contribución específica de grupo al volumen molar estándar en la medida que se aumenta el tamaño de los solutos.

En el estudio presentado en esta contribución se analiza el comportamiento volumétrico de series homologas de resorcinarenos tanto iónicos como no-iónicos en solventes acuosos y no acuosos, tanto en función de la concentración como también el efecto de la temperatura. Los resultados arrojan información sobre el comportamiento de las series homologas y cómo el efecto aditivo es fuertemente dependiente de la naturaleza del solvente.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Propiedades Molares Estándar de Resorcinarenos Aminados en Agua y DMSO

Nicolás Espitia-Galindo*, Edgar F. Vargas.

Laboratorio de Termodinámica de Soluciones, Departamento de Química, Universidad de los Andes, Bogotá D.C., Colombia

n.espitia@uniandes.edu.co

En este trabajo se sintetizaron y caracterizaron dos resorcin[4]arenos aminados, el cloruro de C-metilresorcin[4]areno tetraminoetilado (TAE) y el cloruro de C-etilresorcin[4]areno tetraminometilado (ETAM), figura 1. Las densidades y velocidades del sonido de las soluciones de estos macrociclos en agua y en DMSO fueron obtenidas a diferentes temperaturas en el rango de 273.15 - 308.15 K. Las incertidumbres experimentales obtenidas fueron $1 \cdot 10^{-5}$ g·cm^{-3} y 0.1 m·s^{-1} para la densidad y velocidad del sonido, respectivamente. A través de estas mediciones se calcularon los volúmenes y las compresibilidades molares estándar. Con estas propiedades se estudió la influencia de aumentar el número de carbonos en las cadenas alifáticas sobre la solvatación de estos macrociclos, y los resultados obtenidos fueron comparados con lo reportado para resorcinarenos sulfonados. En este estudio se encontró que la contribución de los grupos -CH_2- al volumen iónico es dependiente de la ubicación de estos en la estructura de los macrociclos, estos resultados fueron corroborados mediante experimentos de RMN bidimensional. Adicionalmente, se obtuvieron los volúmenes de transferencia y se estudió el efecto del aumento de la temperatura sobre la solvatación de estos resorcinarenos

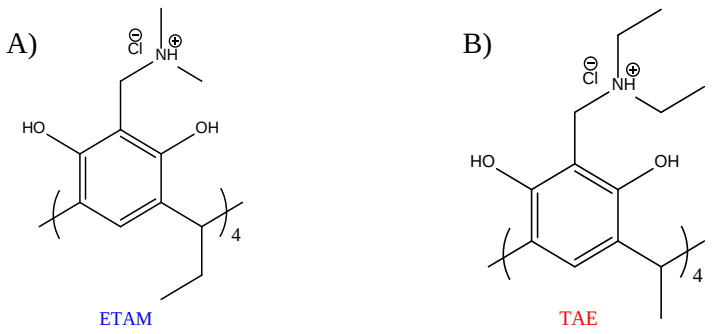


Figura 1. Estructura molecular del A) ETAM y B) TAE.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

PETROQUÍMICA Y GEOQUÍMICA

XVI-31-O ***CARACTERIZACIÓN GEOQUÍMICA DE CARBONES COLOMBIANOS ANTRACÍTICOS Y SEMIANTRACÍTICOS***

Caracterización Geoquímica de Carbones Colombianos Antracíticos y Semiantracíticos

Billy Rodríguez [a*], **Maribel Barajas** [b], **Natalia Castañeda** [c], **Harry González** [d]

[a] *Grupo de trabajo de geoquímica orgánica, Dirección de Laboratorios, Servicio Geológico Colombiano*
* brodriguez@sgc.gov.co

Palabras Claves: Carbón; Antracita; elementos menores; trazas

Debido a los elevados índices de contaminación ambiental y al calentamiento global generado por las actividades antropogénicas se han generado restricciones para el uso de los combustibles fósiles, entre ellos el carbón. Colombia al poseer unas reservas significativas y al tener diversidad de carbones necesita comenzar a evaluar su uso potencial en otros campos y conocer de manera detallada las posibles implicaciones ambientales asociadas a su composición química. El Servicio Geológico Colombiano ha venido desarrollando proyectos de Investigación enfocados en estos dos propósitos, principalmente en el estudio de nanomateriales obtenidos a partir de carbón mineral, su caracterización geoquímica y las potenciales implicaciones ambientales que estos puedan generar.

Se realizó la caracterización geoquímica de carbones de alto rango (antracíticos y semiantracíticos) de los departamentos de Cundinamarca, Boyacá, Santander, Valle del Cauca y Cauca, haciendo particular énfasis en la composición de elementos que pueden ser potencialmente peligrosos para el ambiente. Se tomaron un total de 38 muestras a las cuales se les determinaron elementos mayores (C, H, N, S, Si, Al, Fe, Ti, Mg, Ca, Na, K, P) menores y trazas (Hg, Cl, F, Mn, Cr, Co, Ni Cu, Zn, As, Sr, y Pb).

Con la información determinada en el laboratorio y con los datos de concentración media mundial (WAC) reportados por Ketris y Yudovich (2009) se calcularon los coeficientes de concentración (CC). Estos permiten inferir si un elemento está enriquecido o agotado. Valores de CC >10 indican que un elemento se encuentra altamente enriquecido y valores de CC 0,5 que se encuentra agotado. Como resultado se obtuvo que solamente el mercurio presenta valores de CC superiores a 10 para en dos muestras correspondientes a los departamentos de Boyacá y de Santander, en el caso del plomo también se presentan dos muestras con valores de CC mayores a 10 correspondientes a muestras del departamento de Cundinamarca, todos los demás elementos presentan valores de CC inferiores a 0,5 lo cual indica que su concentración está agotada .Estos resultados permiten concluir que los carbones antracíticos y semiantracítiucos del país cuaentan con concentraciones agotadas de los elementos potencialemtne peligrosos permitiendo que su uso en aplicaciones alternativas sea viable desde el punto de vista ambiental.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XVI-34-O ESTUDIO DE ELEMENTOS DE TIERRAS RARAS PRESENTES EN PATIOS DE CENIZAS DE CARBÓN DE TERMOELÉCTRICAS DE COLOMBIA

Estudio de Elementos Tierras Raras Presentes en Patios de Cenizas de Carbón de Termoeléctricas de Colombia

Manuel H. Romero Moreno[a]*, Sonia Guerra Lemoine[a], Héctor Enciso Prieto[a], Alicia Montes Álvarez[a], John Medina Rueda[a], Diego Bustos Torres[a], Milena Robayo Manrique[a]

[a] *Dirección de Laboratorios, Servicio Geológico Colombiano, Colombia.*
mhromero@sgc.gov.co

Palabras Clave: Elementos Tierras Raras; cenizas de carbón; potencial; termoeléctricas.

Actualmente, los elementos Tierras Raras (REE: de sus siglas en inglés Rare Elements Earth) más escandio (Sc) e itrio (Y) (REE + Y o REY) son considerados elementos estratégicos debido a su demanda mundial para aplicaciones tecnológicas como catalizadores, imanes permanentes, energía renovable, baterías y aditivos metalúrgicos para la industria espacial (Fu et al., 2022). En este sentido, el carbón y las cenizas de carbón se han identificado como una fuente alternativa de estos elementos. Con el objetivo de identificar y cuantificar el contenido de REY presentes en las cenizas de carbón, se estudiaron muestras tomadas de los patios de cenizas, producidas durante la combustión del carbón en la generación de energía eléctrica en dos plantas termoeléctricas de Colombia. Se realizó el muestreo en los patios de cenizas, toma de muestras de cenizas volantes y de fondo, para cada termoeléctrica; para un total de 237 muestras de cenizas de carbón. Posteriormente, las muestras se prepararon y analizaron con la técnica analítica ICP-MS.

Los resultados indican que la suma de las concentraciones de REY cuantificadas en las cenizas de carbón para la termoeléctrica *A* fue de 525 mg/kg y para la termoeléctrica *B* de 258 mg/kg. A pesar de ello, las cenizas de la termoeléctrica *A* contienen una concentración media de Ce (152,57 mg/kg) por encima de la media mundial (140 mg/kg). Asimismo, las cenizas de la termoeléctrica *B*, tiene una concentración media de Sc (63,67 mg/kg) en las cenizas volantes que se encuentra por encima de la media mundial (24 mg/kg), al igual que en las cenizas de fondo (37,03 mg/kg) y de patio (51,91 mg/kg). La suma de las concentraciones se encuentra por debajo del punto de corte (800 mg/kg) o límite para realizar beneficio de REY, según la literatura asociada. Sin embargo, para decisiones sobre procesos de recuperación se debe tener en cuenta la variación de los precios en el mercado de tierras raras y el avance técnico-científico de los procesos de beneficio. Asimismo, es necesario continuar el estudio geoquímico de carbón y sus cenizas como fuentes potenciales de REY en las diferentes zonas carboníferas del país.

Fu, B., Hower, J. C., Zhang, W., Luo, G., Hu, H., & Yao, H. (2022). A review of rare earth elements and yttrium in coal ash: content, modes of occurrences, combustion behavior, and extraction methods. In Progress in Energy and Combustion Science (Vol. 88). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.pecs.2021.100954.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XVI-35-O EFECTO DE LA SALINIDAD DEL AGUA EN LA INTERACCIÓN CRUDO PESADO COLOMBIANO/ROCA: UN ESTUDIO EXPERIMENTAL

Efecto de la Salinidad del Agua en la Interacción Crudo Pesado Colombiano/Roca: un Estudio Experimental

Gladys R. Cepeda[a,*], Wilmar A. Contreras[a], Rafael Cabanzo[a], Nicolás Santos-Santos[b], Julio C. Pérez[b], Enrique Mejía-Ospino[a,b].

[a] *Laboratorio de Espectroscopia Atómica y Molecular (LEAM), Universidad Industrial de Santander, Colombia.*
[b] *Grupo de Investigación en Tomografía Computarizada para Caracterización de Yacimientos (GIT), Universidad Industrial de Santander, Colombia.*

* *Autor de correspondencia: gladys.cepeda@correo.uis.edu.co*

Palabras Claves: salinidad; crudo pesado; arenisca; tensión interfacial; mojabilidad; potencial zeta.

En general, se acepta que entre el crudo y la roca hay una fina película de agua con un gran número de iones que interactúan con cada una de estas fases. Estos iones pueden dar lugar a una interacción positiva entre la roca y el crudo, lo que resulta en una mojabilidad de la roca al crudo y, por tanto, en una menor productividad del yacimiento [1].

Algunos estudios han concluido que la modificación de la salinidad del agua inyectada puede generar regiones menos hidrófobas de la roca debido a un cambio en el número de iones que interactúan en la interfase. Esto favorece la desorción del crudo de la superficie de la roca y aumenta el factor de recuperación [2]. En este trabajo se evaluó el efecto producido por la salinidad del agua en la interacción entre un crudo pesado colombiano y una roca tipo arenisca. Para ello, el crudo y la roca fueron caracterizados por Espectroscopía Infrarroja (FTIR-ATR) y difracción de rayos X, respectivamente. El agua de salinidad variable se preparó en un rango de concentración de 45000 ppm a 1000 ppm utilizando sales inorgánicas de grado analítico. A continuación, se midió la tensión interfacial crudo pesado/agua por el método de la gota colgante, el potencial zeta crudo/agua, roca/agua y el ángulo de contacto en sistemas crudo pesado/agua/roca por el método de la gota cautiva. Nuestros resultados mostraron que el agua de baja salinidad tiene un efecto favorable sobre estas propiedades interfaciales. Encontramos un valor óptimo de salinidad que conduce a una reducción de la tensión interfacial de alrededor del 50%. Además, a valores bajos de salinidad del agua se observó una mayor repulsión entre las interfases que condujo a una débil interacción crudo pesado/roca y, en consecuencia, a un aumento en la mojabilidad de la roca al agua.

Referencias

[1] M. Mohammed and T. Babadagli, "Wettability alteration: A comprehensive review of materials/methods and testing the selected ones on heavy-oil containing oil-wet systems," Adv. Colloid Interface Sci., vol. 220, pp. 54–77, 2015, doi: 10.1016/j.cis.2015.02.006.

[2] M. J. Alshakhs and A. R. Kovscek, "Understanding the role of brine ionic composition on oil recovery by assessment of wettability from colloidal forces," Adv. Colloid Interface Sci., vol. 233, pp. 126–138, 2016, doi: 10.1016/j.cis.2015.08.004.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Caracterización Geoquímica de Circones Mediante LA-ICP-MS-Q

Daniel A. Cortes [a*], Jimmy A. Muñoz[a], Carolina Jiménez[a]

[a] *Grupo de investigaciones y aplicaciones nucleares y geocronológicas, Servicio Geológico Colombiano, Colombia*
**dacortesm@sgc.gov.co*

Palabras Claves: elemento traza; procesos geodinámicos; ablación láser; espectrometría de masas.

Los circones son minerales comunes en las rocas ígneas y metamórficas, su abundancia y resistencia a la alteración los convierten en una herramienta valiosa para estudiar la evolución geológica de la Tierra a lo largo del tiempo (1); además tienden a incorporar elementos traza durante su crecimiento, lo que da indicios sobre la composición del magma, las condiciones de cristalización y las fuentes de material (2). Por tanto, la geoquímica de circones por el método LA-ICP-MS es crucial para investigar procesos geodinámicos.

El método de análisis consiste en hacer incidir un pulso de un láser tipo excimer de 193nm sobre la superficie de los circones provocando la volatilización del material y formación de un plasma que es enviado y analizado por medio de ICP-MS, permitiendo así la cuantificación de elementos traza e isótopos.
Para la implementación del método se emplearon: láser *Teledyne Excite+* y el espectrómetro de masas cuadrupolo *Thermofisher iCAP RQ*. Se han empleado estándares de origen natural tales como 91500 (3), Plesovice, Temora, Kara-19, RAK-17, entre otros.

Con el fin de optimizar el método han variado parámetros analíticos como: tamaño del punto del láser, frecuencia, fluencia, voltaje y flujos MFC. La reducción de datos se llevó a cabo en el software Iolite 4, empleando el esquema de reducción de datos *Trace Elements*.

Para la cuantificación de los 23 elementos traza se realizaron dos calibraciones (4):

1. Calibración con estándar interno, donde se empleó el promedio de la intensidad de la señal de ^{29}Si.
2. Calibración externa llevada a cabo con el estándar 91500 con el fin de corregir la deriva del equipo.

Se encontró que las condiciones analíticas óptimas del método están dadas por fluencia de 5.6 J/cm^2, punto de 35 um, voltaje de 7 mJ y flujos de 0.35 L/min. Bajo estas condiciones analíticas los valores de ppm obtenidos para los analitos detectables caen dentro de los rangos de concentración reportados para circón en la literatura. Por lo tanto, se concluye que el método desarrollado es viable para la caracterización de circones.

1. Belousova, E. A., Griffin, W. L., O'Reilly, S. Y., & Fisher, N. L. (2002). Igneous zircon: trace element composition as an indicator of source rock type. Contributions to mineralogy and petrology, 143, 602-622.
2. Chapman, J. B., Gehrels, G. E., Ducea, M. N., Giesler, N., & Pullen, A. (2016). A new method for estimating parent rock trace element concentrations from zircon. Chemical Geology, 439, 59-70.
3. Wiedenbeck, M., Hanchar, J. M., Peck, W. H., Sylvester, P., Valley, J., Whitehouse, M., ... & Zheng, Y. F. (2004). Further characterisation of the 91500 zircon crystal. Geostandards and Geoanalytical Research, 28(1), 9-39.
4. https://docs.google.com/document/d/1hxxDQDBa-dircGbPfr1XDsSUH2PJv9jt/edit

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

INVESTIGACIÓN DE LAS POSICIONES DE IRRADIACIÓN DEL REACTOR NUCLEAR IAN-R1 DEL SERVICIO GEOLÓGICO COLOMBIANO PARA DATACIÓN CON TÉCNICAS DE TERMOCRONOLOGÍA

Edgar M. López [a], Myriam R. Gutiérrez [a *], Laura A. Beltrán [a], Oscar A. Sierra [a], Jimmy A. Muñoz [a], Mary L. Peña [b], Jaime Sandoval [a].

Dirección de Asuntos Nucleares, Servicio Geológico Colombiano, Colombia.
Dirección de Recursos Minerales, Servicio Geológico Colombiano, Colombia.

mlopez@sgc.gov.co

Palabras Claves: Reactor nuclear; Flujo térmico; Termocronología; Método del detector externo; Geocronología.

El presente estudio describe la investigación experimental y teórica para la caracterización y optimización de las posiciones de irradiación en el Reactor Nuclear de Investigación IAN-R1 del Servicio Geológico Colombiano para muestras geológicas, con el fin de realizar dataciones por medio de la técnica de huellas de fisión en rocas que contienen minerales tales como apatitos y zircones, los cuales, mediante irradiación con un flujo termalizado de neutrones revelan la huellas de fisión inducidas de 235U. Se realizaron mediciones en la periferia del núcleo, en las posiciones donde se tendría la mayor contribución de neutrones térmicos, respecto a los neutrones epitérmicos. En cuanto a la metodología experimental, se utilizaron varios monitores triples de oro zirconio (monitores Al-Au y Zr), cuya sección eficaz permite la discriminación de neutrones térmicos y epitérmicos, dichos monitores fueron irradiados a una potencia térmica de 30kW, en las posiciones de irradiación G1 y G3 y usando un grafito de apantallamiento en la fila G para aumentar la termalización de neutrones epitérmicos en las posiciones denominadas H1 y H3, estos monitores fueron posteriormente analizados mediante la técnica de activación neutrónica.



Figura 1. Posición de montajes de monitores de flujo y barras de grafito en el Reactor IAN-R1.

De igual forma mediante modelamiento en Monte Carlo usando el software MCPNX 6.1, se realizó un análisis teórico de las mismas posiciones de irradiación para comparar los resultados, usando las dos metodologías y mostrando que la posición adecuada hasta el momento, para el posicionamiento de las muestras es H1, a una altura de barra de combustible de 10 cm por debajo de su centro, en cuanto a los resultados se describe que las magnitudes de flujo térmico correspondiente a 4.23X1010 nv y para flujo epitérmico 2.66x109nv respectivamente, mostrando una relación de cadmio de Rcd 15.9. Se concluye que en el Reactor Nuclear del Servicio Geológico Colombiano se podrían realizar las irradiaciones para la técnica de huellas de fisión con los flujos existentes.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

PRODUCTOS NATURALES

IX-36-O ***PERFIL METABÓLICO DE UNA FRACCIÓN DE TRITERPENOS PENTACÍCLICOS DE CECROPIA ANGUSTIFOLIA Y SU EVALUACIÓN PRECLÍNICA EN BIOMODELOS DE PREDIABETES TIPO 2***

Perfil Metabólico de una Fracción de Triterpenos Pentacíclicos de *Cecropia angustifolia* y su Evaluación Preclínica en Biomodelos de Prediabetes Tipo 2

Johanna V López [a] ***, Guillermo L Montoya** [b]

a. *Maestría en Ciencias - Biotecnología. Universidad Icesi, Cali, Valle del Cauca, Colombia.*

b. *Facultad de Ingeniería, Diseño y Ciencias Aplicadas. Escuela de Ciencias Aplicadas e Industria Sostenible, Departamento de Ciencias Farmacéuticas y Químicas, Universidad Icesi, Cali, Valle del Cauca, Colombia.*

** Autor de correspondencia: jvlopez1@icesi.edu.co*

Palabras Claves: diabetes, Cecropia, triterpenos pentacíclicos, suplemento dietario, seguridad, eficacia.

La diabetes mellitus y las enfermedades metabólicas son consideradas como la epidemia del siglo XXI, cuya mortalidad equipara los decesos ocasionados por las guerras mundiales. De acuerdo con cifras del DANE, en el primer trimestre del 2023 se generaron **19.661** decesos debido a enfermedades relacionadas con la obesidad, siendo estas las principales causas de muerte en el país. El grupo de investigación pretende aportar una solución por medio del desarrollo de agentes terapéuticos a partir de la biodiversidad. Actualmente trabajamos con compuestos enfocados al control de la obesidad y la diabetes tipo 2. Se realizó la caracterización del perfil metabólico sobre la expresión de triterpenos en *Cecropia angustifolia* empleando técnicas modernas como LC-MS y MALDI-TOF. Para entender el comportamiento cinético se evaluaron estos compuestos en biomodelos complejos sanos en donde logramos aumentar 5 veces el parámetro de biodisponibilidad. A nivel *in vitro* se evaluó la acumulación intracelular de ácidos grasos, la captación de glucosa, los niveles de citoquinas proinflamatorias TNF- α, IL-1β y IL-6 y la citotoxicidad en líneas celulares HepG2, 3T3-L1, C2C12 y J774A.1 relacionadas con la obesidad y diabetes. Finalmente, se empleó un modelo murino de obesidad inducida en el que se evidenció que nuestras moléculas tienen un efecto positivo sobre la tolerancia a la glucosa y el peso corporal. Estos resultados experimentales no sólo proporcionan información crucial que abre las puertas para futuras investigaciones en el desarrollo de suplementos dietarios con mecanismos modernos de vehiculización de fitoquímicos, sino que también permite ver la gran necesidad de garantizar el apalancamiento económico para la innovación y la aceleración de empresas de este sector en el país resolviendo un problema de salud pública.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-37-O ***ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA Y ANTIOXIDANTE DE HIDROGELES A BASE DE EXTRACTOS ENCAPSULADOS DE ALOE VERA Y CÚRCUMA***

Actividad antimicrobiana y antioxidante de hidrogeles a base de extractos encapsulados de Aloe Vera y Cúrcuma

Julie F. Benavides [a]*, **John J. Rojas** [b], **Yasmin E. Lopera** [c]

[a] *Facultad de Salud, Universidad Industrial de Santander, Colombia*
[b] *Facultad de Ciencias Farmacéuticas, Universidad de Antioquia, Colombia*
[c] *Unidad de Investigación y Desarrollo, AOXLAB S.A.S, Colombia*

* *Autor de correspondencia: jfbenare@uis.edu.co*

Palabras Claves: hidrogel; antioxidante; antimicrobiana; cúrcuma; aloe vera

Las enfermedades infecciosas representan un importante problema de salud que se agrava con la multiresistencia a los antimicrobianos, por otro lado, las enfermedades crónicas no transmisibles son la principal causa de muerte y discapacidad en el mundo ya que requieren tratamientos y cuidados a largo plazo; con lo anterior surge la necesidad de buscar alternativas para el control y prevención de estas enfermedades, en este sentido, la aloe vera y la cúrcuma, reportan actividad antimicrobiana y antioxidante, debido a la presencia de compuestos bioactivos como fenoles, heterósidos antraquinónicos, terpenoides, carbohidratos, enzimas, aminoácidos, vitaminas, ácidos orgánicos y aceites volátiles. Los extractos de origen natural son reconocidos a nivel científico por sus propiedades biológicas, sin embargo, exhiben baja estabilidad, por lo que se protección frente a condiciones ambientales adversas como luz, oxígeno, humedad y temperatura, mediante técnicas como la encapsulación, a su vez, para que sean productos de uso, se requiere de su formulación en matrices como son los hidrogeles. En este trabajo se presenta el desarrollo, caracterización y evaluación antimicrobiana y antioxidante de hidrogeles a base de extractos encapsulados de aloe vera y cúrcuma, para este fin, se realizó un diseño de mezclas de polisacáridos con extractos vegetales entre el 2 y 10 % p/p, los cuales fueron previamente encapsulados por coacervación. Los hidrogeles obtenidos fueron caracterizados fisicoquímicamente, se adelantaron controles de calidad y mediciones del comportamiento reológico (amplitud y frecuencia); finalmente se realizó evaluación de actividad antimicrobiana, frente a cepas de *Escherichia coli* (ATCC 5922) y *Staphylococcus aureus* (ATCC 25923) tomando como control un antibiótico comercial y se evaluó la capacidad antioxidante por el método ORAC. El grado de entrecruzamiento entre los materiales gelificantes permitió una matriz con alta capacidad de absorción y propiedades viscoelásticas para la contener el extracto encapsulado de aloe vera y cúrcuma al 5.0%. Los resultados de actividad antimicrobiana para la formulación del hidrogel mostraron porcentajes de inhibición del 90 y 80% en cepas de *E. coli* y *S. aureus* respectivamente, por otro lado, la evaluación antioxidante para la formulación obtenida fue de 12000 µmoles trolox/100g, resultados que estuvieron acordes a lo reportado en la literatura.

AGRADECIMIENTOS: Este trabajo fue financiado por la vicerrectoría de Investigación y Extensión UIS, proyecto 3749

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-38-O ***COMPARACIÓN DE MÉTODOS DE EXTRACCIÓN NO CONVENCIONALES EN LA CARACTERIZACIÓN QUÍMICA Y ACTIVIDAD REPELENTE DEL ACEITE ESENCIAL DE CROTON MALAMBO H. KARST. (EUPHORBIACEAE)***

Comparación de Métodos de Extracción no Convencionales en la Caracterización Química y Actividad Repelente del Aceite Esencial de *Croton malambo H. Karst. (Euphorbiaceae)*

Bielka Pérez[a], Cristobal Caicedo[a], Dary Mendoza[a*]

[a] *Grupo de Investigación Productos Naturales y Bioquímica de Macromoléculas, Universidad del Atlántico, Colombia.*
** Dary Mendoza: darymendoza@mail.uniatlantico.edu.co*

Palabras Claves: *Croton malambo*; aceites esenciales; microondas; ultrasonido; quimiometría

Croton malambo es un arbusto endémico del bosque seco tropical del caribe colombiano. El aceite esencial (AE) de su corteza posee actividad repelente contra gorgojos que infectan granos almacenados. El propósito fue evaluar el efecto de métodos de extracción no convencionales, basados en ultrasonido y microondas, en la composición química y actividad repelente del AE de *C. malambo*. El material vegetal se recolectó en el municipio de Juan de Acosta (Atlántico) en agosto de 2022. Los AEs se extrajeron a partir de 20 g de corteza seca y pulverizada usando: hidrodestilación por arrastre de vapor (HD) y extracción secuencial por ultrasonido de baño-HD (USB-HD), ultrasonido de sonda-HD (USS-HD); y ultrasonido de sonda-hidrodestilación asistida por microondas (USS-HDAM) variando el tiempo de maceración ultrasónica. Se evaluó el rendimiento de extracción (%p/p), velocidad máxima de transferencia de masa (C1) y capacidad máxima de extracción (C2). Los AEs se caracterizaron por espectroscopia IR-ATR y CG-EM combinadas con quimiometría. La actividad repelente se evaluó contra el gorgojo *Sitophilus zeamais*.

El método de extracción influyo significativamente en el rendimiento (% peso aceite/peso corteza), así: USS-HD (2.15±0.21%) > USB-HD (1.80±0.05%) > USS-HDAM (1.61± 0.03%) > HD (0.69±0.03%). USS-HDAM mostró máximos valores de C1 y C2 con 20 min de maceración. El IR-ATR reveló diferencias en la región de huella dactilar de los AEs. El análisis de componentes principales (ACP) de los datos espectrales evidenció patrones de agrupamiento de los AEs de acuerdo con el método de extracción (varianza = 79% con 2CP), con influencia de la banda de 760 cm-1 (vibración de flexión =C-H). Resultados similares se obtuvieron a partir del perfil de compuestos volátiles de AEs, con influencia de los compuestos metileugenol, elemicin, alfa-tuyeno, alfa/beta-pineno y alfa-terpineol, demostrando el efecto del método de extracción en la composición química de los AEs. Adicionalmente, AEs obtenidos por USS-HD exhibieron mayor actividad repelente contra *S. zeamais* (70% y 45 % a las 24 y 48 horas, respectivamente) con el AE al 10% v/v en DMSO. Estos resultados aportan al conocimiento del efecto del método de extracción en la calidad de materias primas para el desarrollo de bioproductos agrícolas.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-39-O ***DIVERSIDAD FITOQUÍMICA DEL CANNABIS COLOMBIANO: UN MUNDO INEXPLORADO DE OPORTUNIDADES TERAPÉUTICAS***

Diversidad Fitoquímica del Cannabis Colombiano: Un Mundo Inexplorado de Oportunidades Terapéuticas

Diego J. Enriquez [a], **Guillermo L. Montoya** [b], **Ulrike Holzgrabe** [c] **Luca Hille** [d], **Stephan Brand** [e], **Yesid A. Ramírez*** [c]

[a] *Maestría en Ciencias - Biotecnología. Universidad Icesi, Cali, Valle del Cauca, Colombia.*
[b] *Facultad de Ingeniería, Diseño y Ciencias Aplicadas. Escuela de Ciencias Aplicadas e Industria Sostenible, Departamento de Ciencias Farmacéuticas y Químicas. Universidad Icesi, Cali, Valle del Cauca. Colombia.*
[c] *Universidad de Würzburg, Instituto de Farmacia y Química de Alimentos,Würzburg, Alemania.*
[d] *Universidad Libre de Berlín, Instituto de Química y Bioquímica, Berlín, Alemania.*
[e] *Symrise AG, Mühlenfeldstrasse1, Holzminden, Alemania.*

*yesid.ramirez@uni-wuerzburg.de

Palabras clave: Cannabinoides; Terpenos; Metabolómica Dirigida; Quimiovares colombianos.

Desde la legalización del cannabis con fines medicinales y científicos en Colombia, el cultivo y transformación de esta planta se ha proyectado como un sistema agroindustrial con un enorme potencial de crecimiento y desarrollo en el país. Colombia se destaca en el cultivo de cannabis gracias a su ventaja competitiva derivada de la diversidad de zonas climáticas y regiones naturales, las cuales a su vez pueden conferir características fitoquímicas únicas a las variedades colombianas. En este estudio, se evaluó la diversidad fitoquímica de 156 variedades de cannabis cultivadas en los departamentos de Cundinamarca, Antioquia, Valle del Cauca, Cauca, Huila, Tolima y La Guajira. Mediante metabolómica dirigida a 10 cannabinoides y 23 terpenoides, se logró clasificar las variedades de cannabis en 4 quimiotipos distintos como se evidencia en la Figura 1; Tipo I (THC-dominante), Tipo II (balanceado), Tipo III (CBD-dominante) y Tipo IV (CBG-dominante).

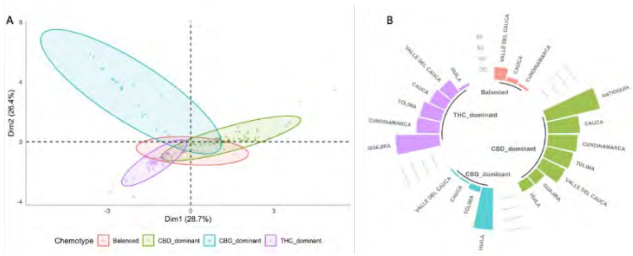


Figura 1. A. Quimiotipos de cannabis; **B**. Distribución de quimiotipos en las regiones.

Los resultados alcanzados proporcionan evidencia sólida sobre la diversidad fenotípica y química del cannabis medicinal cultivado legalmente en Colombia. Estos hallazgos resaltan el potencial terapéutico del cannabis colombiano dado los comprobados usos de los quimiotipos encontrados en el tratamiento del dolor crónico, la epilepsia y la ansiedad. La identificación del quimiotipo IV en variedades colombianas es de gran trascendencia para la industria del cannabis del país ya que representa una oportunidad valiosa para explorar los prometedores efectos analgésicos, antiinflamatorios y neuroprotectores atribuidos al cannabigerol, lo que abre la puerta a nuevas posibilidades de las terapias basadas en cannabis.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-40-O OBTENCIÓN DE METABOLITOS CON POTENCIAL APLICACIÓN COSMÉTICA A PARTIR DE MACROALGAS MARINAS COLOMBIANAS POR MEDIO DE EXTRACCIÓN CON SOLVENTES EUTÉCTICOS NATURALES (NADES)

Obtención de Metabolitos con Potencial Aplicación Cosmética a partir de Macroalgas Marinas Colombianas por medio de extracción con Solventes Eutécticos Naturales (NADES)

Verónica M Tamayo[a*]; Jhonny Colorado[a]; Didier Álvarez[a]; Diana Márquez[a]; Stefano Dall'Acqua[b], Leonardo Castellanos[c]; Constain H. Salamanca[d]; Alejandro Martínez[a].

[a] *Grupo de Productos Naturales Marinos, Facultad de Ciencias Farmacéuticas y Alimentarias, Universidad de Antioquia, Calle 70 N°52-21, Medellín, Colombia*
b Gruppo di Prodotti Naturali, Dipartimento di Scienze del farmaco, Università degli studi di Padova, Italia
[c]*Estudio y Aprovechamiento de Productos Naturales Marinos y Frutas de Colombia, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Facultad de Ciencias, Departamento de Química.*
[d] *Grupo de Investigación Ciencia de Materiales Avanzados, Escuela de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia sede Medellín, Cra. 65 #59a-110, Medellín 050034, Colombia*

* Autor de correspondencia: alejandro.martinez@udea.edu.co

Palabras clave: solventes eutécticos naturales; macroalgas; cosmética; biodegradable

Los solventes eutécticos naturales o NADES (Natural Deep Eutectic Solvents) son mezclas de sustancias orgánicas usadas para extraer metabolitos provenientes de fuentes naturales. En este trabajo, se prepararon y caracterizaron fisicoquímicamente varios NADES reportados en la literatura en aplicaciones cosméticas. Éstos fueron empleados en la obtención de metabolitos de interés cosmético a partir de algas marinas del Caribe Colombiano. La caracterización fisicoquímica de los NADES se llevó a cabo por medio de estudios reológicos, espectroscopía IR y ^{1}H-RMN, y el material biológico pulverizado por microscopía y análisis superficial (BET). Se realizaron pruebas cualitativas a los extractos de 12 muestras de macroalgas para determinar la presencia de polisacáridos, compuestos fenólicos y micosporinas. La cuantificación de los compuestos fenólicos totales se efectuó mediante la prueba de Folin-Ciocalteau; la presencia de micosporinas por espectrofotometría UV y la capacidad captadora de radicales libres con la prueba de DPPH. Los resultados mostraron que la mayor recuperación de compuestos fenólicos se obtuvo usando el NADES betaína/glucosa/agua 1:1:5 (BGluW115), superando la extracción con agua, principalmente en las muestras del género *Sargassum*. Además, se encontró que el incremento de la escala de extracción aplicando 10, 20 y 50 mL de BGluW115 sobre 1.0 g *Sargassum sp.* mejoró la eficiencia de extracción y, asimismo, que la mejor rata de recuperación se dio en las primeras 24 horas, alcanzando la máxima saturación con 10 mL de NADES y logró reproducirse con diferentes lotes de glucosa y betaína. La caracterización fisicoquímica de los NADES mostró que éstos se comportan como fluidos Newtonianos y que el área superficial de las algas pulverizadas no afectó la recuperación de los compuestos fenólicos. Por otro lado, la caracterización espectroscópica mostró cambios entre el NADES y los componentes individuales. Este estudio es una contribución al uso de los NADES como medios de extracción sostenibles y eco-amigables, comparado con métodos tradicionales, y a la vez plantea nuevos retos experimentales que desarrollen el enfoque bioprospectivo orientado a aplicaciones cosméticas de productos naturales.
Agradecimientos: los autores agradecen al Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovacion, MinCiencias, a través del Programa "BALCAR-Q: Bioprospección y Química de Algas del Caribe", contrato 80740-739-2020.

IX-42-O ***IDENTIFICACIÓN QUÍMICA DE METABOLITOS SECUNDARIOS DE ASTROPECTEN MARGINATUS Y EVALUACIÓN DE SU ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA***

Identificación Química De Metabolitos Secundarios De *Astropecten marginatus* Y Evaluación De Su Actividad Antimicrobiana

Ingrid D. Martínez*[a], Gilmar G. Santafé[a], Orfa I. Contreras[a], Jorge A. Quirós[a].

[a] *Laboratorio de Química de los Productos Naturales, Universidad de Córdoba, Colombia.*
** Autor de correspondencia: ingridmartinez3124@gmail.com*

Palabras Claves: *Astropecten marginatus*; actividad antimicrobiana; Bahía de Cispatá; estrella de mar.

La bioprospección de productos naturales marinos ha aumentado significativamente en las últimas décadas, lo que ha llevado al descubrimiento sin precedentes de nuevas moléculas. Los investigadores comúnmente se dirigen a grupos taxonómicos particulares, regiones marinas y moléculas de grupos químicos específicos. Como parte de los organismos marinos están los equinodermos, los cuales son excelentes modelos para estudiar las estrategias de defensa química y sus implicaciones en el estudio de productos naturales. En esta investigación se evaluó una especie perteneciente a este filo la estrella de mar *Astropecten marginatus* centrándonos en la identificación de compuestos y sus propiedades antimicrobianas. La muestra de estudio fue recolectada en la bahía de Cispatá en el Caribe colombiano, fue sometida a extracción de maceración en frío con etanol y concentrada a presión reducida obteniendo el extracto etanólico, posteriormente, aplicando procesos cromatográficos se aisló la fracción de ácidos grasos, los cuales fueron derivatizados hasta los correspondientes ésteres metílicos. El análisis de los espectros obtenidos mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC / MS), permitió identificar 17 ácidos grasos de los cuales 15 son saturados mostrando variedad con relación a la longitud de las cadenas carbonadas (C_{14}-C_{25}) y algunos con ramificaciones del grupo metilo, destacándose los ácidos hexadecanoico, octadecanoico y heptadecanoico, los cuales fueron los constituyentes más abundantes, con porcentaje de 28,71%, 14,26% y 3,49%, respectivamente. Además, se identificaron tres alquenos, tres alcanos, dos esteroles y un terpeno, todos en porcentajes bajos. La actividad bactericida del extracto etanólico de *A. marginatus* se evaluó mediante el método de microdilución contra cepas gram positivas y negativas de aislados clínicos de *Staphylococcus aureus, Pseudomonas aeruginosa, Enterococous faecium y Escherichia coli* mostrando reducción del crecimiento bacteriano del 90.1%, 78.12%, 89.45%, 85.52%, respectivamente, en el intervalo de concentración entre 156.5-5000 µg/mL. El mejor efecto se reflejó en *Enterococous faecium* con valores de IC_{90}= 193.9 µg /mL. El mismo extracto también se evalúo contra cepas de *Candida tropicalis* y *glabrata*, mostrando valores CI_{50} de 470.1 y 751.3 µg/ml respectivamente. De acuerdo con los resultados encontrados el extracto etanólico de *A. marginatus* podría considerarse como una fuente potencial en la producción de compuestos químicos naturales marinos con propiedades antimicrobianas.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-43-O ***DESARROLLO DE UNA BIBLIOTECA DE PRODUCTOS NATURALES AISLADOS Y CARACTERIZADOS DE ESPECIES VEGETALES ESTUDIADAS EN LA REGIÓN DEL EJE CAFETERO, COLOMBIA***

Desarrollo de una Biblioteca de Productos Naturales Aislados y Caracterizados de Especies Vegetales Estudiadas en la Región del Eje Cafetero, Colombia

Johny R. Rodriguez [a]*, Héctor F. Cortes [b], Hoover A. Valencia [c], Oscar M. Mosquera [d], Jose L. Medina [e]

[a,b,c] *Grupo de Investigación en Fotocatálisis y Estado Sólido (GIFES), Universidad tecnológica de Pereira, Colombia*
[d] *Grupo de Biotecnología – Productos naturales (GBPN), Universidad tecnológica de Pereira, Colombia*
[e] *Computer Aided Drug Desing in the School of Chemistry (DIFACQUIM), Universidad Nacional Autónoma de México, México*
* Autor de correspondencia: johny.rodriguez@utp.edu.co

Palabras Clave: Biblioteca de moléculas; descriptores moleculares; búsqueda de similitud molecular; productos naturales.

El análisis de conjuntos de datos químicos es un desafío considerable para los investigadores debido a la gran cantidad y dispersión de la información. Por esta razón, resulta fundamental organizarlos en bases de datos que faciliten el acceso a esta. Esto también aplica a la recopilación y organización de datos relacionados con productos naturales obtenidos de plantas y otras fuentes naturales. En el caso específico de productos naturales derivados de plantas, este tipo de información cobra relevancia al considerar la amplia biodiversidad que posee Colombia, con más de 28,000 especies de plantas identificadas (Bernal, Gradstein, & Celis, 2020). Los metabolitos secundarios extraídos de fuentes naturales representan una valiosa oportunidad de aprovechar los recursos naturales. En este sentido, la conservación de estos recursos y su reconocimiento adquieren una gran relevancia. La Plataforma Intergubernamental de Ciencia-Política sobre Biodiversidad y Servicios de los Ecosistemas (IPBES) propone la compilación de trabajos revisados por pares en bases de datos o plataformas multidisciplinarias como estrategia de conservación de la biodiversidad. La presente investigación se enfoca en identificar y organizar en una biblioteca las moléculas reportadas de productos naturales derivados de plantas estudiados en la región del eje cafetero. Esto se llevó a cabo mediante una revisión exhaustiva de bases de datos y la recopilación de información proveniente de grupos de investigación de las universidades del Quindío, Caldas y Tecnológica de Pereira en los últimos años. El objetivo es contar con un inventario actualizado de moléculas que puedan ser empleadas en diversas aplicaciones, lo que abre amplias posibilidades para futuras investigaciones y estudios aplicados. Además, esta recopilación de datos permite realizar análisis comparativos con otros conjuntos de datos utilizando herramientas quimioinformáticas. Para alcanzar estos objetivos, se llevó a cabo una búsqueda exhaustiva de las moléculas estudiadas en los departamentos del Eje Cafetero, para luego analizar sus propiedades mediante métodos estadísticos y quimioinformáticos, incluyendo aspectos fisicoquímicos, moleculares, biológicos y toxicológicos. El resultado final de este proyecto es el desarrollo de una interfaz web que pondrá esta biblioteca a disposición del público en general para su consulta abierta, posibilitando la navegabilidad, gestión y visualización de los datos.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-44-O ***Fracciones Controladas Químicamente. La Plataforma Ideal en Colombia para el Desarrollo de Bioproductos***

Fracciones Controladas Químicamente. La Plataforma Ideal en Colombia para el Desarrollo de Bioproductos

Guillermo L. Montoya [a,*]

[a] *Facultad de Ingeniería, Diseño y Ciencias Aplicadas. Escuela de Ciencias Aplicadas e Industria Sostenible, Departamento de Ciencias Farmacéuticas y Químicas. Universidad Icesi, Cali, Valle del Cauca. Colombia.*
** Autor de correspondencia: glmontoya@icesi.edu.co*

Palabras Claves: Productos naturales; fracciones químicas; bioprocesos; biotecnología; bioeconomía.

Existe un sentimiento generalizado de desconfianza hacia programas de descubrimiento de moléculas a partir de fuentes naturales. Son procedimientos costosos, con alta probabilidad de fracaso y el nivel de inversión y desarrollo que requiere no puede ser soportada por la industria farmacéutica nacional. Afortunadamente, los extractos de plantas se han convertido en la piedra angular del desarrollo de productos vegetales dirigidos no solo a salud humana, sino también como suplementos en nutrición, al desarrollo de productos de aseo y limpieza y en la industria textil y de materiales. Un país en desarrollo y con la ubicación geográfica de Colombia, debe enfocar esfuerzos para aprovechar su biodiversidad tanto como las biomasas de procesos agroindustriales, debido a que son una fuente viable de industrialización. En particular quiero compartir la experiencia de trabajo desarrollado en mi laboratorio, aplicando la química de productos naturales en renglones económicos con mayor inversión.

Aditivos fitogénicos agroindustriales

Los aditivos fitogénicos son combinaciones estandarizadas y controladas de compuestos bioactivos presentes en extractos de plantas con aportes comprobados sobre la salud animal. Estos productos pretenden aportar alto nivel de inmunidad disminuyendo el uso de antibióticos promotores de crecimiento y convirtiéndolos en arsenales metabólicos químicamente controlados que brindan productividad y optimización. Este programa de Bioeconomía financiado por el Ministerio de Ciencias promueve el desarrollo de una empresa sostenible de extractos vegetales estandarizados.

Extractos naturales y biotecnológicos

El enfoque anterior debe considerar una aproximación diferente cuando la fuente vegetal no es domesticada, pero igualmente haciendo uso de la biodiversidad. A partir de una planta andina nativa se desarrolla una plataforma de activos químicamente controlados empleando biotecnología para crear procesos sustentables con miras a la fabricación de suplementos nutricionales en salud humana. Este proyecto financiado por Ministerio de Ciencias y recursos de la Universidad han permitido crear una plataforma de desarrollo que cubre desde la generación de conocimiento básico hasta su posible industrialización.

Estos ejemplos son parte de una posición académica sobre el desarrollo enfocando capacidades básicas con acompañamiento a las necesidades del sector industrial. Colombia deberá reconocer sus potencialidades y orientar esfuerzos combinando academia-empresa-estado como una estrategia de innovación y desarrollo tecnológico.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-46-O ***POTENCIAL ANTICANCERIGENO DEL CANNABINOIDE CBG PRESENTE EN EXTRACTOS ETANOLICOS DE CANNABIS***

Potencial Anticancerigeno del Cannabinoide CBG Presente en Extractos Etanolicos de Cannabis

***Paola A. Arango[a], Ricardo Benítez[a]**

[a]*Grupo de Investigación QPN, Universidad del Cauca, Colombia*
*Paola A. Arango: parango@unicauca.edu.co

Palabras claves: *Cannabis* medicinal., Actividad antioxidante., Actividad citotoxica., efecto sequito.

El *Cannabis* ha sido estudiado por su amplio perfil de fitocompuestos, se le atribuye propiedades medicinales, y cada día se estudia con mayor interés por los resultados que se han obtenido, sobre todo en los últimos años. En el presente estudio se evaluó la actividad citotóxica (cáncer de mama y cáncer de colon) de dos variedades de Cannabis (A y B) cultivadas en el norte del Cauca. El material vegetal seco fue suministrado por un cultivador licenciado para Cannabis no psicoactivo. Los extractos se realizaron por dos metodologías de extracción; extracción en frío (1) y extracción RSO (2), se utilizó etanol al 99.8 % como solvente.

Los fitocompuestos se analizaron por cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) para cuantificación de cannabinoides y cromatografía de gases acoplado a espectrometría de masa (CG-EM) para identificación y cuantificación de terpenos. La citotoxicidad se analizó a través del ensayo de sulforrodamina B, con las líneas celulares de cáncer HT-29 (cáncer colon), MCF-7 (cáncer mama) y MCF-10A (línea normal mama). En la tabla 1 se presenta el contenido de cannabinoides y terpenos en los extractos. Se puede observar que los extractos de la variedad A, presentan una mayor concentración de cannabinoides y terpenos, pero la variedad B, extracción rápida fue el único extracto que registró la presencia del cannabinoide CBG (1,23 %). En la tabla 2 se observa los resultados del IC_{50} para cada extracto, es evidente que los extractos de la variedad A presentan los valores más bajos, se atribuye a la mayor concentración de cannabinoides y terpenos en estos extractos. Pero al calcular el IS (índice de selectividad), para cada una de las líneas celulares, el extracto B-1, aunque presenta los valores más bajos de cannabinoides y terpenos totales, registró un IS con valores superiores a 2.8 en la línea de cáncer de mama y cáncer de colon, lo cual se atribuye a la presencia del cannabinoide CBG, lo cual aumenta la actividad biológica, gracias al efecto sequito.

Tabla 1. Caracterización fitoquímica de extractos etanolicos de Cannabis

Composición Fitoquímica								
% de Cannabinoides					Concentración de Terpenos (□g/mL)			
Extracto	**CBD (%)**	**CBDA (%)**	**THCA (%)**	**CBG (%)**	**□-Cariofileno**	**Guaiol**	**□-Bisabolol**	**Humeleno**
A-1	□1.98	□8.80	□0.26	/	□303.50	□181.92	□329.27	□87.33
A-2	□2.32	□8.89	□0.32	/	□218.55	□112.26	□238.66	□61.66
B-1	□1.05	□6.07	□0.23	**□1,23**	□140.97	□149.21	□180.01	□38.89
B-2	□0.95	□4.99	□0.22	/	□133.25	□105.68	□140.79	□35.08

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Tabla 2. Actividad citotóxica

Extracto	Valores IC50 (µg/mL)			IS (MCF-7)	IS (HT-29)
	MCF-10	MCF-7	HT-29		
A-1	41.2 □ 2.8	61.4 □ 8.3	49.0 □ 3.1	0.67	0.84
A-2	50.2 □ 2.1	33.2 □ 0.8	61.1 □ 7.5	>1.5	0.82
B-1	>150	53.7 □ 2.7	52.7 □ 7.5	**>2.8**	**>2.8**
B-2	66.5 □ 6.2	50.4 □ 6.1	113.2 □ 34.5	1.31	0.59

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-47-O METABOLITOS ESPECIALIZADOS DETECTADOS POR GC-MS EN HOJAS FRESCAS DE DURANTA ERECTA L., VERBENACEAE

Metabolitos especializados detectados por GC-MS en hojas frescas de *Duranta erecta* L., Verbenaceae.

José H. Isaza Martínez [a]*, Alejandro Zuluaga Tróchez [b]

[a] *Grupo de Investigación en Productos Naturales y Alimentos (GIPNA), Universidad de Valle, Colombia*
[b] *Ecología y diversidad vegetal, Universidad de Valle, Colombia*
* *Autor de correspondencia: jose.isaza@correounivalle.edu.co*

Palabras Claves: *Duranta erecta*; GC-MS; Hydrocarbons; Fatty acids; Terpenoids

El género *Duranta* (Verbenaceae) es un grupo de arbustos y árboles pequeños, nativo de América tropical y subtropical, pero que ha sido introducido en varias regiones de África y Asia. Actualmente comprende 29 especies aceptadas. *Duranta erecta* L. es una especie nativa de México, Florida, el Caribe y el norte de Suramérica, incluyendo Colombia. Esta especie se planta con frecuencia con fines ornamentales en regiones tropicales y subtropicales de ambos hemisferios y frecuentemente se escapa de cultivo y se naturaliza.

La muestra se colectó en el campus universitario de Meléndez de la Universidad del Valle y fue identificada en el Herbario Luis Sigifredo Espinal-Tascón de la Universidad del Valle (CUVC), por el profesor A. Zuluaga. Las hojas frescas (10 g) se cortaron en porciones de un cm x un cm y se sometieron a extracción asistida por ultrasonido con acetona (125 mL x 3 x 15 min cada una) E1. Este extracto se secó a presión reducida y una muestra se analizó por GCMS. Al extracto E1 se le fraccionó con diclorometano E1F1 y con acetonitrilo E1F2. Ambos se inyectaron nuevamente para confirmar los componentes. La fracción E1F2 se sililó y se inyectó nuevamente en el GCMS, para confirmar alcoholes y ácidos grasos. De esta manera se identificaron once *n*-alcanos *n*C27-*n*C37, de los cuales los impares son mayoritarios, cuatro 1-alquenos pares $C_{14} - C_{20}$, n-alcanoles, ácidos grasos saturados e insaturados, neofitadieno, fitol, isofitol, vitamina E, triterpenos escualeno, derivados de ursano y oleanano, esteroides stigmasterol, □-sitosterol y sus acetatos, entre otros, por comparación de los espectros de masas a 70 eV con las bibliotecas Wiley y NIST, así como con los índices de retención de Kovats basados en la serie homóloga de *n*-alcanos (*n*C10 – *n*C39), en una columna Rxi-1HT (30 m x 0.25 mm ID x 0.25 □m Film) con un gradiente lineal de temperatura desde 40 ºC hasta 360 ºC a 10 ºC/min.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-237-O ***DISEÑO EXPERIMENTAL PLACKETT-BURMAN: OPTIMIZACIÓN DEL PRETRATAMIENTO DE CÁNNABIS PARA LA CUANTIFICACIÓN DE METALES POR ICP-MASAS***

Diseño Experimental Plackett-Burman: Optimización del pretratamiento de cánnabis para la cuantificación de metales por ICP-Masas

Daniel E Arias Ramirez[*b,c], **Juan S Mutis**[a,c], **Chiara Carazzone** [a,b,c]

[a] *Laboratorio de Técnicas Analíticas Avanzadas en Productos Naturales (LATNAP), Departamento de Química-Universidad de los Andes, Cra 1 Nº 18A – 12, Bogotá, 111711, Colombia*

[b] *Laboratorio de Espectrometría ICP-Ms, Vicedecanatura de Investigación-Universidad de los Andes, Cra 1 Nº 18A – 12, Bogotá, 111711, Colombia*

[c]*Laboratorio de Investifacion e inovacion en la industria del Cannabis en Colombia (CannaLab), Departamento de Química-Universidad de los Andes, Cra 1 Nº 18A – 12, Bogotá, 111711, Colombia*

* de.arias@uniandes.edu.co

Palabras claves: Digestión de muestras, ICP-Masas, Optimización, Cannabis, Metales pesados.

A pesar de las controversias, las políticas encaminadas a la legalización del cannabis están experimentando un progresivo aumento en su alcance, ampliando cada vez el potencial de esta planta en el ámbito económico. Por lo tanto, es imprescindible desarrollar métodos analíticos que posibiliten la cuantificación de parámetros químicos que permitan establecer su calidad según los criterios establecidos por ley. Como es el caso de los metales pesados, específicamente: el arsénico, cadmio, mercurio y plomo. Estos elementos se pueden cuantificar con gran precisión y sensibilidad mediante técnicas avanzadas como la espectrometría de masas acoplada a plasma por inducción (ICP-Ms), permitiendo determinar la presencia o ausencia de estos y garantizando que no se generen perjuicios a la salud en lo que corresponde a los metales pesados. Por la alta sensibilidad inherente a la técnica ICP-Ms, se requieren precauciones adicionales en la etapa de pretratamiento de la muestra. Este enfoque garantizará que el proceso de digestión exhiba la capacidad de lograr la disolución completa de la muestra, sin menoscabar los analitos de interés ni comprometer la integridad de la misma mediante la introducción de contaminantes.

En el presente estudio, se llevó a cabo un diseño experimental tipo Plackett-Burman en el cual se identificaron 7 variables. Estas variables se seleccionaron por su potencial impacto en los resultados finales de la cuantificación. Además, utilizando un material certificado de la NIST, se determinaron los parámetros óptimos con relación al método de cuantificación en el ICP-MS. Así mismo, se estableció un valor máximo y mínimo basado en lo reportado en la literatura para cada una de las variables asociadas a la digestión, lo que condujo a un total de 12 experimentos. Así, se obtuvieron los valores óptimos de digestión que cumplen con los parámetros analíticos de cuantificación, garantizando la confiabilidad y precisión de los resultados obtenidos.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-252-O ***EXTRACCIÓN ASISTIDA POR ULTRASONIDO DE COMPUESTOS BIOACTIVOS DE CANNABIS SATIVA. L EMPLEANDO DISOLVENTES EUTÉCTICOS PROFUNDOS BASADOS EN MENTOL***

Extracción asistida por ultrasonido de compuestos bioactivos de *Cannabis sativa.* L empleando disolventes eutécticos profundos basados en mentol

Jhan C Delgado[a*], Ricardo Benítez[b]

[a]Grupo de investigación Química de productos naturales (QPN), Universidad del Cauca, Colombia
[b]Grupo de investigación Química de productos naturales (QPN), Universidad del Cauca, Colombia
*Autor de correspondencia: jhandelg@unicauca.edu.co

Palabras claves: Cannabis sativa, Disolventes eutécticos profundos, mentol, ultrasonido, productos naturales

El *Cannabis sativa* contiene diversos compuestos bioactivos que son de interés medicinal e industrial, entre los cuales destacan los cannabinoides, terpenos y flavonoides, se han desarrollado diversas técnicas de extracción y fabricación de productos derivados, sin embargo, es importante avanzar en el desarrollo de métodos sostenibles y eficaces para obtener fitocannabinoides y metabolitos del cannabis; en ese sentido, los solventes eutécticos profundos (DES) han surgido como una alternativa más segura a los solventes orgánicos tradicionalmente empleados. En este estudio, se prepararon 19 DES basados en mentol, ácidos carboxílicos y □-sitosterol, las mezclas se prepararon pesando cada componente en una relación molar especifica, se calentó entre 50 - 80 °C con agitación constante hasta obtener un líquido homogéneo, la caracterización se realizó por la medición de densidad, viscosidad y espectroscopía infrarroja, revelando DES hidrofóbicos de baja viscosidad (< 70 mPa.s). Para comprobar la capacidad de los DES de extraer fitocannabinoides, terpenos, fenoles, flavonoides, clorofilas y ceras, se pesaron 100 mg de muestra (cogollos) descarboxilada y sin descarboxilar, se agregaron 5,00 mL del DES para obtener una relación cannabis: DES 1:20, se empleó un equipo Branson 1510 sonicando por 40 min y se centrifugó a 10000 rpm por 5 min; una alícuota del sobrenadante se diluyó en etanol y se analizó por cromatografía de gases y cromatografía liquida de alto rendimiento para la cuantificación de terpenos y cannabinoides respectivamente, la determinación de flavonoides, fenoles y clorofilas se realizó por métodos espectrofotométricos Uv-vis y el contenido de ceras por gravimetría. La mayor extracción de CBD y CBDA se logró con Mentol:Acido decanoico 2:1 siendo 126,51 mg/g y 141,88 mg/g respectivamente, resultados superiores a los obtenidos con etanol; la mayor eficiencia de extracción para terpenos se logró con Mentol: Acido octanoico 1:1 siendo mayor a la lograda con etanol, entre los terpenos destaca la extracción de □-Pinene, ß-Myrcene, D-Limonene, ß-Caryophyllen, Humulene, □-Guaiol y □-Bisabolol, por otro lado los 19 DES extrajeron más flavonoides y fenoles que el etanol y demostraron ser más selectivos, extrayendo menos impurezas, como clorofila y ceras.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-265-O ***ESTUDIO DEL POTENCIAL FUMIGANTE DE 24 ACEITES ESENCIALES PARA EL CONTROL DE THRIPS (THYSANOPTERA: THRIPIDAE).***

Estudio del Potencial Fumigante de 24 Aceites Esenciales para el Control de Thrips (Thysanoptera: Thripidae).

Natalia V Delgado-Bogotá [a*], Oscar J Patiño-Ladino [a], Juliet A Prieto-Rodríguez [b]

[a] *Bioprospección y modelado molecular en el diseño, síntesis y exploración racional de productos naturales (BiomolUN) Universidad Nacional, Colombia, Sede Bogotá*
[b] *Grupo de Investigación Fitoquímica Universidad Javeriana (GIFUJ), Pontificia Universidad Javeriana*
** Autor de correspondencia: ndelgadob@unal.edu.co*

Palabras Claves: Aceites esenciales; thrips; toxicidad fumigante; plantas aromáticas

Los insectos de la familia Thripidae conocidos popularmente como thrips son especies polífagas que afectan a un gran número de cultivos de importancia económica reduciendo los rendimientos de producción y calidad de los productos[1,2] El control químico es uno de los métodos más utilizados, sin embargo muchos de los productos comerciales son altamente tóxicos y poco selectivos, lo que ha ocasionado serios problemas ambientales y la aparición de cepas resistentes.[3] En la búsqueda de alternativas de control, los aceites esenciales (AEs) se consideran como una fuente potencial de insecticidas debido a su diversidad química, propiedades fisicoquímicas y sus roles ecológicos [4]. En este sentido, el presente estudio se buscó determinar el potencial fumigante de AEs de plantas introducidas en Colombia frente a thrips. Las especies aromáticas fueron seleccionadas por sus antecedentes de actividad insecticida, fácil adquisición y/o altos contenidos de AEs. Algunos aceites se adquirieron de manera comercial y otros fueron obtenidos a partir de material vegetal por técnicas de destilación de arrastre con vapor e hidrodestilación. El tamizaje de actividad fumigante de los AEs se realizó por el método de vial en vial a una concentración de 50 ppm[5], ya los AEs que causaron una mortalidad superior al 50% se les realizó su caracterización química mediante análisis por GC-MS y se les determinó su CL_{50}. Los resultados del tamizaje indicaron que 18 AEs fueron activos frente a thrips con CL_{50} en un rango entre 2.602 y 21.39 µL/L aire, entre los que se destacan los provenientes de *Ruta graveolens, Anethum graveolens, Foeniculum vulgare*. En los AEs bioactivos se destaca en su composición química la presencia de α-felandreno, D-limoneno, (-)-R-carvona, eucaliptol, linalol y éter de eneldo, los cuales pueden ser responsables de la actividad fumigante exhibida por los AEs. Este estudio contribuye a la caracterización química e insecticida de AEs de plantas aromáticas y muestra su potencial como alternativa efectiva para el control de thrips.

Referencias.

1. Hoddle, M. (2013). Applied Biological Control Research_ Biological Control of Western Flower Thrips
2. Avellaneda, J ., Díaz,M ., Coy-Barrera, E., Rodríguez, D., Osorio,C. (2019) Rose volatile compounds allow the design of new control strategies for the western fower thrips (*Frankliniella occidentalis*). Journal of Pest Science.
3. Zepeda, I.(2018). Manejo sustentable de plagas agrícolas en México. Agricultura, sociedad y desarrollo, 15(1), 99-108.
4. Alcala Orozco , M., Caballero Gallardo, K., Stashenko, E. E., & Olivero Verbel, J. (2019). Repellent and Fumigant Actions of the Essential Oils from Elettaria cardamomum (L.) Maton, Salvia officinalis (L.) Linnaeus, and Lippia origanoides (V.) Kunth Against *Tribolium castaneum* and *Ulomoides dermestoides*. *Journal of Essential Oil Bearing Plants*.
5. Patiño, W; Nagles, J; Bustos , J; Delgado, W; Herrera, E; Suárez, L; Priente, J; Patiño, O. (2021). Effects of Essential Oils from 24 Plant Species on S*itophilus zeamais Motsch* (Coleoptera, Curculionidae). Insects, 12(6), 532.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-289-O USO DE GNPS Y METABOANALYST PARA LA COMPARACIÓN E IDENTIFICACIÓN DE HUELLAS DACTILARES DEL PERFIL VOLÁTIL DE RONES COLOMBIANOS Y CACHAÇAS BRASILERAS MEDIANTE HS-SPME-GC-MS

Uso de GNPS y Metaboanalyst para la Comparación e Identificación de Huellas Dactilares del Perfil Volátil de Rones Colombianos y Cachaças Brasileras mediante HS-SPME-GC-MS

Juan E. González [a], **Sebastián F. Valencia** [b], **Nicolás Ratkovich** [b], **Chiara Carazzone** [a]*

[a] *Laboratory of Advanced Analytical Technique in Natural Products (LATNAP), Universidad de los Andes, Colombia*

[b] *Grupo de Diseño de Productos y Procesos, Institución (GDPP), Universidad de los Andes, Colombia*

* *Autor de correspondencia: c.carazzone@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: HS-SPME; GC/MS; ron; cachaça; volátiles

El ron es un aguardiente aromático o bebida espirituosa con un consumo de aproximadamente 1.1 millones de litros/año a nivel mundial. Su elaboración es un proceso complejo que consta de múltiples pasos: selección de materia prima, fermentación alcohólica, destilación, envejecimiento y en algunos casos la inclusión de aditivos. Cada paso del proceso afecta significativamente la composición del perfil volátil del licor, lo que genera cambios en las propiedades organolépticas del producto y por ende la experiencia del consumidor. En este sentido, se buscó entender cuáles son los principales parámetros que afectan notablemente el perfil volátil del licor entre dos países suramericanos productores de rones, Colombia y Brasil. Un método de micro extracción en fase sólida por espacio de cabeza seguida de cromatografía gaseosa acoplado a un detector de espectrometría masas (HS-SPME-GC-MS) fue desarrollado para determinar los compuestos orgánicos volátiles presentes en cada licor. Para identificar las diferencias de cada uno de los licores analizados se usaron pruebas quimiométricas no supervisadas (PCA) y supervisadas (PLS-DA), además de análisis de agrupamientos (Mapas de calor y dendrogramas). Como se evidencia en el PLS-DA mostrado en la **figura 1**, los rones colombianos y cachaças brasileras pueden ser estadísticamente diferenciados debido a múltiples compuestos volátiles pertenecientes a cada licor.

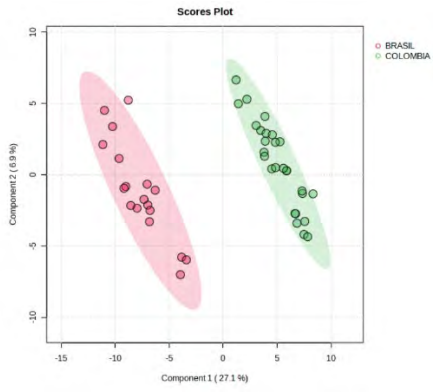


Figura 1. Discriminación entre licores colombianos y brasileros mediante PLS-DA usando 9 rones colombianos y 6 cachaças brasileras.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Referencias:

[1] Belmonte-Sánchez, J. R. *et al.* Rum classification using fingerprinting analysis of volatile fraction by headspace solid phase microextraction coupled to gas chromatography-mass spectrometry. *Talanta* **187**, 348–356 (2018).

[2] Cardoso, D. R. *et al.* Comparison between cachaça and rum using pattern recognition methods. *J. Agric. Food Chem.* **52**, 3429–3433 (2004).

[3] Liu, Z. *et al.* Comparison of two data processing approaches for aroma marker identification in different distilled liquors using comprehensive two-dimensional gas chromatography-time-of-flight mass spectrometry dataset. *J. Food Sci.* 2870–2881 (2023) doi:10.1111/1750-3841.16624.

[4] Franitza, L., Nicolotti, L., Granvogl, M. & Schieberle, P. Differentiation of Rums Produced from Sugar Cane Juice (Rhum Agricole) from Rums Manufactured from Sugar Cane Molasses by a Metabolomics Approach. *J. Agric. Food Chem.* **66**, 3038–3045 (2018).

[5] Xiao, Z. *et al.* Characterization of aroma compounds of Chinese famous liquors by gas chromatography-mass spectrometry and flash GC electronic-nose. *J. Chromatogr. B Anal. Technol. Biomed. Life Sci.* **945**–**946**, 92–100 (2014).

[6] Franitza, L., Granvogl, M. & Schieberle, P. Characterization of the Key Aroma Compounds in Two Commercial Rums by Means of the Sensomics Approach. *J. Agric. Food Chem.* **64**, 637–645 (2016).

IX-337-O ***CARACTERIZACIÓN QUÍMICA Y COMPUTACIONAL DE COMPUESTOS PRESENTES EN ALSTONIA SCHOLARIS (DITTA)***

Caracterización Química y Computacional de Compuestos Presentes en *Alstonia scholaris* (Ditta)

Ana M. Rodelo [a], **Roxana del C. Riobueno** [a], **Fernando Castro-Gómez** [b] **& Oscar I. Camacho-Romero** [a-c]*

[a] *Grupo de Investigación Fitoquímica (GIF-UdelA), Facultad de Química y Farmacia, Universidad del Atlántico, Colombia*

[b] *Grupo de Investigación Max Planck, Facultad de Química y Farmacia, Universidad del Atlántico, Colombia*

[c] *Centro de Servicios Farmacéuticos y Monitoreo de Fármacos (CESFAR), Universidad del Atlántico, Atlántico, Colombia*

* *Autor de correspondencia: oscarcamacho@mail.uniatlantico.edu.co*

Palabras Claves: *Alstonia scholaris*; farmacocinética; composición química; & predictores.

Alstonia scholaris (Ditta)-Apocynaceae, posee propiedades antidiarreicas, antiespasmódicas, y antiinflamatorias-analgésicas asociadas a hojas, y raíz, en países como India la utilizan preparaciones artesanales para ulceras y dolores reumáticos (1); se reportan propiedades antiparasitarias, anticancerígenas, antidiabéticas y antibacterianas (2). En este estudio se buscó identificar características químicas, farmacocinéticas y medicinales mediante pruebas químico-instrumental y predicciones computacionales. Se planteo un trabajo de tipo descriptivo-evaluativo, de corte transversal, las hojas del Ditta fueron recolectadas en Puerto Colombia (Atlántico), posteriormente se elaboraron extractos por maceración alcohólica 96%, se filtró y concentró hasta relación 1:1. Se realizaron ensayos de marcha fitoquímica preliminar, determinación por UHPLC-ESI+-Orbitrap-HRMS para compuestos y se aplicó predictores como SwissADME, AdmetSAR 2.0®, y ECOSAR en relación a los compuestos identificados. Como resultados se identificaron alcaloides, taninos, fenoles y triterpenos, en el método instrumental la mayor concentración fue ácido ursólico (71,3 mg kg^{-1}) y ácido rosmarínico (5,7 mg kg^{-1}), a través de predictores se obtuvo que son sustancias seguras, debido que son pocas peligrosas (toxicidad oral aguda clase III), y no presentan toxicidad AMES, ni carcinogénicos. Es necesario aplicar procesos para volver admisibles estos compuestos en formulaciones farmacéuticas debido a sus bajas solubilidades, cumpliendo con la ley de Lipinski.

Tabla 1. *Resultados de los predictores sobre la química medicinal de compuestos identificados*

Compuestos identificados	Filtros		Leadlikeness	Accesibilidad sintética
	PAINS	Brenk		
Ácido rosmarínico	1 alerta	2 alertas	No	3.38
Ácido ursólico	0 alerta	1 alerta	No (2 violaciones)	6.21

En la tabla 1, encontramos los filtros PAINS y Brenk, el predictor en PAINS detectó para ácido rosmarínico algunas alteraciones en ensayos biológicos con falsos positivos debido al catecol presente en su estructura; para Brenk se encontró en ambos casos, la presencia de fragmentos que podrían resultar presuntamente tóxicos o con propiedades responsables de una farmacocinética deficiente. En los leadlikeness se mira la optimización, en ninguno de los dos casos fue posible.

En conclusión, esta planta presenta constituyentes que otorga propiedades antiinflamatorias, y anticancerígena, debido a la presencia de compuestos triterpenicos, fenoles y alcaloides, siendo una alternativa en el tratamiento de diversas patologías, y generando la necesidad de explorar todo su potencial terapéutico.

Bibliografía

1. Zhou, H.-X., Li, R.-F., Wang, Y.-F., Shen, L.-H., Cai, L.-H., Weng, Y.-C., Zhang, H.-R., Chen, X.-X., Wu, X., Chen, R.-F., Jiang, H.-M., Wang, C., Yang, M., Lu, J., Luo, X.-D., Jiang, Z., & Yang, Z.-F. (2020). Total alkaloids from *Alstonia scholaris* inhibit influenza a virus replication and lung immunopathology by regulating the innate immune response. Phytomedicine: International Journal of Phytotherapy and Phytopharmacology, 77(153272), 153272. https://doi.org/10.1016/j.phymed.2020.153272
2. Sun, S.-F., Zhong, H.-J., Zhao, Y.-L., Ma, X.-Y., Luo, J.-B., Zhu, L., Zhang, Y.-T., Wang, W.-X., Luo, X.-D., & Geng, J.-W. (2022). Indole alkaloids of *Alstonia scholaris* (L.) R. Br. alleviated nonalcoholic fatty liver disease in mice fed with high-fat diet. Natural Products and Bioprospecting, 12(1). https://doi.org/10.1007/s13659-022-00335-2
3. Daina A, Michielin O, Zoete V. SwissADME: una herramienta web gratuita para evaluar la farmacocinética, la semejanza con los fármacos y la compatibilidad con la química medicinal de moléculas pequeñas. Representante de ciencia [Internet]. 2017 [citado el 29 de agosto de 2023];7(1):1–13. Disponible en: https://www.nature.com/articles/srep42717
4. Camacho-Romero, Oscar Ivan; Barrios-Márquez, Stefanny; Lozano-Contreras, Eduardo; García-Viloria, Leonardo Actividad larvicida de extractos hidroalcohólicos de *Pala scholaris* (L.) Roberty sobre larvas de estadio III de *Aedes aegypti* Journal of Negative and No Positive Results, 4 (10), 2019, pp. 1022-1031

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-427-O ANÁLISIS DE POLIFENOLES Y CAPSAICINOIDES PRESENTES EN VARIEDADES DE AJÍES (CAPSICUM SP.) CULTIVADOS EN COLOMBIA MEDIANTE HPLC-DAD-MSN

Análisis de Polifenoles y Capsaicinoides Presentes en Variedades de Ajíes (*Capsicum sp.*) Cultivados en Colombia Mediante HPLC-DAD-MS^n

Mónica T. Pérez-Beltrán[a,*], **Gerson-Dirceu López**[a], **Chiara Carazzone**[a]

[a] *Laboratory of Advanced Analytical Techniques in Natural Products (LATNAP), Universidad de los Andes, Colombia*
** Autor de correspondencia: mt.perezb@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: *Capsicum sp.*; polifenoles; capsaicinoides; HPLC-DAD-MS^n

Los ajíes (*Capsicum sp.*) son frutos de interés comercial ampliamente consumidos en el mundo. Muchos estudios se han llevado a cabo para analizar los metabolitos presentes en los ajíes. Estos son excelentes fuentes de antioxidantes, que contrarrestan la oxidación de los lípidos mediante la captación de radicales libres y, por lo tanto, se discute su capacidad para proteger contra el cáncer, la anemia, la diabetes y enfermedades cardiovasculares. No obstante, no existe hasta la fecha una caracterización sobre polifenoles y capsaicinoides en muestras de ajíes cultivados en suelo colombiano. En esta investigación se recolectaron muestras de diferentes variedades de ají cultivadas en el territorio nacional y se obtuvieron extractos que contenían ambas familias de compuestos de interés. Los extractos fueron analizados mediante cromatografía líquida de alta resolución con detector de arreglo de diodos (HPLC-DAD) acoplado mediante fuente de electroespray a espectrometría de masas tándem (MS/MS). Los datos obtenidos fueron analizados mediante pruebas quimiometricas (PCA), analisis multivariados y clústeres jerárquicos para discriminar las variedades de ajíes según sus perfiles cromatográficos (Figura 1). Se identificaron diversas clases de polifenoles, incluidos flavonoles, flavonas y ácidos fenólicos. Además de las capsaicinas que son los compuestos responsables de la característica picante de esta fruta. Los resultados proporcionan información novedosa sobre la composición química de los ajíes cultivados en diferentes regiones colombianas, destacando su potencial valor nutricional y funcional. Además, estos pueden ser útiles para la selección de variedades específicas con perfiles de compuestos bioactivos deseables y para promover su uso en la industria alimentaria y farmacéutica.

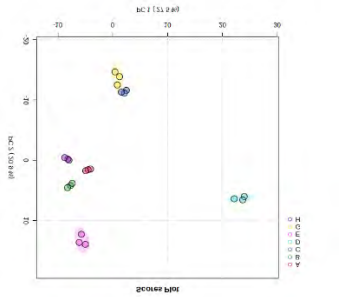


Figura 1. Análisis de componente principales (PCA) de algunas de las variedades de ajíes analizadas.

Referencias

1. Ruíz Ruíz, M. Implementación de un proyecto productivo de ají dulce como modelo de desarrollo agrícola para pequeños productores en el municipio de Córdoba, Bolívar, Universidad de la Salle: El Yopal, 2016.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

2. Bosland, P. W.; Votava, E. J.; Votava, E. M. Peppers: Vegetable and Spice Capsicums; Crop production science in horticulture; CABI, 2012.
3. Shi, Z.; El-Obeid, T.; Riley, M.; Li, M.; Page, A.; Liu, J. High Chili Intake and Cognitive Function among 4582 Adults: An Open Cohort Study over 15 Years. Nutr. 2019, Vol. 11, Page 1183, 2019, 11 (5), 1183.
4. Kulkarni, Y. A.; Suryavanshi, S. V.; Auti, S. T.; Gaikwad, A. B. Capsicum: A Natural Pain Modulator. En Nutritional Modulators of Pain in the Aging Population; Academic Press, 2017; pp 107–119.
5. Cvejić, J. H.; Krstonošić, M. A.; Bursác, M.; Miljić, U. Polyphenols. Nutraceutical Funct. Food Components Eff. Innov. Process. Tech., 2017, 203–258.
6. Jeong, W. Y.; Jin, J. S.; Cho, Y. A.; Lee, J. H.; Park, S.; Jeong, S. W.; Kim, Y. H.; Lim, C. S.; Abd El-Aty, A. M.; Kim, G. S.; et al. Determination of polyphenols in three Capsicum annuum L. (bell pepper) varieties using high-performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry: Their contribution to overall antioxidant and anticancer activity. J. Sep. Sci., 2011, 34 (21), 2967–2974.
7. Meckelmann, S. W.; Riegel, D. W.; Van Zonneveld, M. J.; Ríos, L.; Peña, K.; Ugas, R.; Quinonez, L.; Mueller-Seitz, E.; Petz, M. Compositional characterization of native Peruvian chili peppers (Capsicum spp.). J. Agric. Food Chem., 2013, 61 (10), 2530–2537.
8. Morales-Soto, A.; Gómez-Caravaca, A. M.; García-Salas, P.; Segura-Carretero, A.; Fernández-Gutiérrez, A. High-performance liquid chromatography coupled to diode array and electrospray time-of-flight mass spectrometry detectors for a comprehensive characterization of phenolic and other polar compounds in three pepper (Capsicum annuum L.) samples. Food Res. Int., 2013, 51 (2), 977–984.
9. Barbosa, S.; Campmajó, G.; Saurina, J.; Puignou, L.; Núñez, O. Determination of Phenolic Compounds in Paprika by Ultrahigh Performance Liquid Chromatography-Tandem Mass Spectrometry: Application to Product Designation of Origin Authentication by Chemometrics. J. Agric. Food Chem., 2020, 68 (2), 591–602.
10. Nagy, Z.; Daood, H.; Ambrózy, Z.; Helyes, L. Determination of Polyphenols, Capsaicinoids, and Vitamin C in New Hybrids of Chili Peppers. J. Anal. Methods Chem., 2015, 2015.
11. Masud Parvez, G. M. Current Advances in Pharmacological Activity and Toxic Effetcs of Various Capsicum Species. Int. J. Pharm. Sci. Res., 2017, 8 (5), 1900–1912.
12. Acquavia, M. A.; Pascale, R.; Pappalardo, I.; Santarsiero, A.; Martelli, G.; Bianco, G. Characterization of Quercetin Derivatives in Crossing Combination of Habanero White and Capsicum annuum Peppers and of Anti-Inflammatory and Cytotoxic Activity. Sep. 2021, Vol. 8, Page 90, 2021, 8 (7), 90.
13. Razola-Díaz, M. D. C.; Gómez-Caravaca, A. M.; de Andrés, J. L.; Voltes-Martínez, A.; Zamora, A.; Pérez-Molina, G. M.; Castro, D. J.; Marchal, J. A.; Verardo, V. Evaluation of Phenolic Compounds and Pigments Content in Yellow Bell Pepper Wastes. Antioxidants 2022, Vol. 11, Page 557, 2022, 11 (3), 557.
14. Elkhedir, A. E.; Iqbal, A.; Zogona, D.; Mohammed, H. H.; Murtaza, A.; Xu, X. Apigenin glycosides from green pepper enhance longevity and stress resistance in Caenorhabditis elegans. Nutr. Res., 2022, 102, 23–34.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Metabolitos Especializados del Fruto de *Clavija lehmannii* Mez. (Primulaceae).

Maria I. Ortega*, Lizbeth L. López, José H. Isaza.

Grupo de Investigación de Productos Naturales y Alimentos, Universidad del Valle, Colombia.
maria.isabel.ortega@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: *Clavija lehmannii*; Primulaceae; *Antioxidantes; HPLC; CG-MS.*

Clavija lehmannii Mez. (Primulaceae) es una especie endémica de Colombia, la cual presenta estudios taxonómicos [1]; sin embargo, no se presenta investigación fitoquímica o de actividad biológica [2], por lo que con esta investigación se pretende realizar la extracción y caracterización de los metabolitos especializados de baja y mediana polaridad junto con la actividad antioxidante.

La investigación se inició con la colecta en la reserva natural "El Refugio", se continuó con un tratamiento de la muestra para proseguir con la obtención de los metabolitos especializados que se encuentran en la cascara, nuez y pulpa, por medio de un proceso de extracción solido-liquido usando como solventes diclorometano y una solución de acetona-agua (7:3).

Para el proceso del perfil cromatográfico de nuez y cáscara, el extracto en diclorometano se analizó en el equipo de cromatografía de gases acoplada a un espectrómetro de masas (CG-MS-QP20Ultra). Los espectros obtenidos de nuez y cáscara se lograron caracterizar por medio de MS e índice de Kovats, entre las moléculas caracterizadas se encuentra el supraeno y algunos ácidos grasos como el ácido palmítico en la nuez, en la cascara se identificó el kaureno y el ácido oleico. Para mejorar el análisis de estas muestras se realizó un proceso de extracción en fase sólida, estos extractos también se analizaron por medio del CG-MS, observándose nuevos compuestos como el (2E)-Octen-1-ol y el éster metílico del ácido hexadecanoico en nuez, y para la cáscara fueron el 2-metil-octacosano y el (2E)-Octen-1-ol.

En el caso del extracto obtenido de la solución acetona-agua (7:3), esta se estudió por medio de cromatografía líquida de alta presión (HPLC). En los cromatogramas de UV-Vis obtenidos se observó que los compuestos presentan absorciones características de los flavonoides especialmente la pulpa por lo cual se decidió llevar a cabo una extracción líquido-líquido de esta, de este proceso se obtuvo una separación de los compuestos, lo cual permitió corroborar la existencia de flavonoides del tipo flavonol, que pueden ser quercetina y kaempferol.

La actividad antioxidante se estudiará por medio de DPPH y Folin-Ciocalteu, se espera que estas pruebas arrojen resultados positivos por la posible existencia de flavonoles [3].

Referencias

1. Ståhl, B. THEOPHRASTACEAE. Flora Neotrópica 2010, 105, 1-161. (accedido 2022/11/22/).JSTOR.
2. Taylor, P.; Arsenak, M.; Abad, M. J.; Fernández, A.; Milano, B.; Gonto, R.; Ruiz, M. C.; Fraile, S.; Taylor, S.; Estrada, O.; et al. Screening of venezuelan medicinal plant extracts for cytostatic and cytotoxic activity against tumor cell lines. Phytother Res 2013, 27 (4), 530-539, Article. DOI: 10.1002/ptr.4752 Scopus.
3. Vellosa, J. C. R.; Regasini, L.O.; Khalil, N. M.; Bolzani, V. d. S.; Khalil, O.A.; Manente, F.A.; et al. Antioxidant and cytotoxic studies for kaempferol, quercetin and isoquercitrin. Eclética química 2011, 36, 07-20.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-497-O ***OBTENCIÓN DE UNA CREMA FACIAL A PARTIR DE EXTRACTO DE CIDRA (SECHIUM EDULE JACQ./SW. VA. VIRENS LEVIS) Y ACIDO SALICÍLICO PARA EL CONTROL DE ACNÉ VULGARIS***

Obtención de una crema facial a partir de extracto de Cidra (*Sechium edule Jacq./Sw. Va. Virens levis*) y Acido Salicílico para el control de *Acné Vulgaris*

María P. Benavides [a] *, Angie P. Acosta [a], Clara M. Mejía [a], Alba L. Duque [a]

[a] *Agroindustria de frutas tropicales, Universidad del Quindío, Colombia.*
**Autor de correspondencia: mariap.benavidesn@uqvirtual.edu.co*

Palabras clave: Extracto, crema facial, *ácné vulgaris*, antibiograma, principio activo.

El acné vulgaris es una afección común en la piel causada en las unidades pilosebáceas, este se presenta en un 80% en edades comprendidas entre 20 y 25 años y afecta a algunas mujeres hasta los 40 años. Se presenta por diversas bacterias como lo son *cutibacterium acnes* y *staphyloccocus epidermis*. Diversos estudios fitoquímicos a cerca de la cidra o guatila han descrito que esta contiene componentes fitoterapéuticos como flavonoides, minerales, proteínas, antioxidantes y aminoácidos que en conjunto presentan actividades antihiperlipidémicas, antiepilépticas, antimicrobianas, entre otras, debido a esto se ha determinado que el extracto de mesocarpio de cidra puede ser un eje potencial y funcional como parte de los principios activos en la formulación de una crema para acné junto con ácido salicílico (AS) el cual es un componente antiacneico.
Se obtuvo un extracto de cidra de la variedad *Virens levis* mediante maceración etanólica del fruto seco con pretratamiento de ultrasonido (MEFSCU), se formuló una crema facial teniendo como principios activos MEFSCU y ácido salicílico al 6 y 1,5% respectivamente. Para la determinación de su eficiencia microbiológica se extrajo una muestra de una lesión cutánea (acné) y se hizo un reconocimiento morfológico por medio de tinción de Gram. Se realizaron 5 antibiogramas de difusión de disco sobre las cepas identificadas, observando la capacidad inhibitoria del ácido salicílico, MEFSCU, AS+MEFSCU, crema y un control negativo (etanol).
Los resultados indicaron que la bacteria inoculada es Gram positiva y posiblemente se trate de una bacteria *staphyloccocus aureus o staphyloccocus epidermis* como se muestra en la figura 1. En los antibiogramas se observa el control negativo (etanol 96%). El AS, MEFSCU, AS+MEFSCU y la crema obtuvieron halos de inhibición de, 8.7, 8.3, 11.7 y 6.7 mm de diámetro respectivamente. Se puede comprobar que la crema cumple su función como control de *acné vulgaris* y el extracto potencia la capacidad inhibitoria del AS en la crema formulada.

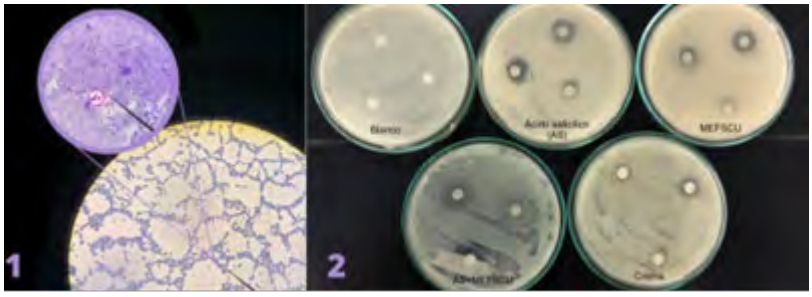


Figura 1. Tinción de bacterias Gram positivas y antibiogramas.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA AMBIENTAL

XIII-60-O ESTUDIO GEOQUÍMICO DE CADMIO Y OTROS ELEMENTOS POTENCIALMENTE PELIGROSOS EN SUELOS ASOCIADOS A CULTIVOS DE CACAO EN YACOPÍ – CUNDINAMARCA

Estudio Geoquímico de Cadmio y otros Elementos Potencialmente Peligrosos en Suelos Asociados a Cultivos de Cacao en Yacopí – Cundinamarca

Olger G. Mendoza[a*], Laura J. González[a*], Luisa F. Dorado[a], Margy P. Acevedo[a], Lina M. Tabares[a], María C. Herrera[a] y Heidy M. Rojas[a]

[a]*Servicio Geológico Colombiano*
[*] *Autor de correspondencia:* ogmendoza@sgc.gov.co; ljgonzalezo@sgc.gov.co

Palabras Clave: Granos de cacao; cadmio; shales; *Theobroma cacao*.

Las plantas de cacao (*Theobroma cacao*) tienen la capacidad de absorber y concentrar cadmio (Cd) en diferentes partes de su estructura, pero se presta especial atención a sus frutos, debido a que estos son consumidos por el ser humano. El Cd es reconocido como un elemento potencialmente peligroso (EPP) que afecta la salud humana y los ecosistemas, especialmente cuando se sobrepasan los niveles de acumulación permitidos. El municipio de Yacopí – Cundinamarca es productor de cacao y debido al contexto geológico de la región, sus suelos productores de cacao se ven influenciados por la presencia de cadmio, originado en las rocas cretácicas de origen marino afectadas por eventos de regresiones y transgresiones marinas, acumulación de materia orgánica y ambientes anóxicos y euxínicos y donde se reconocen rocas como shales, limolitas, arcillolitas, areniscas y calizas.

Con los resultados analíticos de las muestras de suelo (*topsoil* y horizontes profundos), roca y granos de cacao se realizaron mapas de distribución geoquímica, y con los resultados analíticos de los *topsoil* se calcularon los factores de contaminación (C_{if}Cfi) e índices de geoacumulación (I_{geo}) para cadmio y otros elementos de interés. Los resultados mostraron un enriquecimiento natural de Cd en los *topsoil*, con valores entre 0,10 ppm y 191 ppm y un background geoquímico de 0,26 ppm a 3,56 ppm, concentraciones que son superiores al promedio mundial el cual corresponde a 0,5 ppm. En el área de estudio, elementos como el Mo mostraron altos índices y factores de enriquecimiento natural; otros elementos como el Se y As también presentaron enriquecimiento, aunque en menor grado.

Las rocas analizadas presentaron valores para Cd entre 0,02 ppm y 112,5 ppm, con una media de 10,36 ppm y una mediana de 1,23 ppm, lo cual corrobora que las rocas sedimentarias de la región son la principal fuente de Cd. El análisis de granos de cacao confirma que los frutos de la planta incorporan Cd en concentraciones que están entre 0,53 ppm y 25,85 ppm, con una media de 7,04 ppm y una mediana de 4,64 ppm. Muestras de agua superficial analizadas no evidencian concentraciones superiores de Cd ni de otros EPP, según la normatividad colombiana.

Los datos obtenidos sugieren que el Cd proviene principalmente de las rocas reconocidas en la región (shales y lodolitas calcáreas), propias de las formaciones Capotes, Peñón y Muzo. En los suelos, debido a las condiciones naturales de pH y Eh, se encuentran especies solubles y biodisponibles como el Cd^{+2} que es incorporado por las plantas de cacao.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Influencia de un Bocashi a partir de Residuos de Café *Castillo* sobre el crecimiento de rábanos

Maria A. Lozano [a], José H. Quintana Mendoza [a], Alexandra Torres Sánchez [a]

[a] *Centro de Investigación Biocalorimetría, semillero sebioca, Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de Pamplona Km 1Via Bucaramanga, Colombia*
** Autor de correspondencia: jhquintanam@gmail.com*

Palabras Claves: bocashi, pericarpio, café, pirólisis.

El pericarpio es un residuo postcosecha de café, rico en lignina y hemicelulosa, compuestos que lo hacen aprovechable como soporte estructural de materiales porosos, teniendo en cuenta lo anterior, la presente investigación desarrollo un sistema pirolítico para obtener biocarbones que mezclados con óxidos alcalinos, como el óxido de calcio (CaO) permitieron la generación de un bocashi, que se caracteriza por su buena retención de materia orgánica y de nutrientes que aumentan la permeabilidad del suelo, reduce las emisiones de gases de efecto invernadero, mejora la porosidad del suelo, aumentan la diversidad microbiana y previene enfermedades.

El bocashi obtenido se caracterizó por espectrometría infrarroja por transformada de Fourier (ATR-FTIR), análisis termogravimétrico (TGA), los volátiles por cromatografía de gases (GC), propiedades fisicoquímicas y porcentaje total de nitrógeno, logrando establecer que se obtiene un material estable, de tipo carbono grafito, con concentraciones de nitrógeno del 15 al 20%. Con estos resultados los bocashi se aplicaron sobre plantas de rábano realzando seguimiento al talla, hoja y largo de raíz, logrando establecer que los materiales sintetizados son apropiados para aumentar el crecimiento de las plantas estudiadas.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Equilibrio, termodinámica y cinética de la remoción del colorante cristal violeta empleando sílice natural como adsorbente

Shyama C. Espinosa[a], Grey C. Castellar[a*], Beatriz M. Cardozo[b], María M. Cely[c], Javier E. Jaramillo[d]

[a]Grupo de Investigación Interdisciplinario de Ciencias Básicas, Universidad Autónoma del Caribe, Colombia
[b]Grupo de Investigación en Materiales, Procesos y Tecnologías de Fabricación, Universidad Autónoma del Caribe, Colombia
[c]Grupo de Investigación CONFORMAT, Universidad del Atlántico, Colombia
[d]Grupo de Investigación en Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de la Costa, Colombia

**Autor de correspondencia: grey.castellar@uac.edu.co*

Palabras Claves: diatomitas; cristal violeta; isoterma de adsorción; energía de Gibbs; modelos cinéticos.

RESUMEN

Las aguas residuales coloreadas vertidas a las fuentes hídricas sin tratamiento alguno representan un problema ambiental crítico, que afecta no sólo la vida de los ecosistemas sino también la salud humana. En esta investigación se evaluó la capacidad de adsorción de una sílice natural procedente del municipio de Chivatá (Boyacá-Colombia), en la remoción del colorante cristal violeta en solución mediante la técnica de adsorción por lotes, estimando las propiedades termodinámicas y la etapa cinética controlante del proceso. Inicialmente a la sílice se le determinaron las propiedades de textura por adsorción-desorción con N_2 a 77 K, los principales grupos funcionales por IRTF y su morfología por MEB. La metodología experimental se desarrolló empleando un diseño multifactorial categórico con factores como la concentración inicial del colorante (300-1000 mg/L), la temperatura (30, 35 y 40°C) y el pH inicial de la solución (entre 5 y 8 unidades). Los resultados de la caracterización de la sílice muestran que se trata de un material mesoporoso con área superficial de 39,3 m^2/g; del espectro IRTF, se observaron las bandas características del SiO_2 debidas a la presencia de los grupos siloxano y silanol y, las micrografías presentaron predomino de frústulas cilíndricas. Del estudio por lote se obtuvo que la capacidad máxima de adsorción alcanzada fue de 96,1 mg/g a 30ºC y pH 8. El ajuste de los resultados a la ecuación linealizada de van't Hoff permitió calcular la entalpía, entropía y energía de Gibbs, mostrando que se trata de un proceso endotérmico espontáneo en el rango de temperaturas evaluadas; además, del ajuste a los diferentes modelos cinéticos, se estableció que la etapa controlante obedece al modelo de pseudosegundo orden, con tiempos de remoción cercanos a los 30 min. En conclusión, la capacidad de adsorción satisfactoria comparada con otros materiales, la espontaneidad del proceso y bajos tiempos de remoción permiten considerar a la sílice natural como un material con potencial adsorbente en la eliminación por lote del colorante cristal violeta.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-253-O ***ESTUDIO DE LA INFLUENCIA DE LA MORFOLOGÍA DE SUSTRATOS DE COBRE EN EL CRECIMIENTO DE NANOTUBOS DE CARBONO A PARTIR DE MATERIA PRIMA RECICLADA***

Estudio de la influencia de la morfología de sustratos de cobre en el crecimiento de nanotubos de carbono a partir de materia prima reciclada

J.F. Portilla[a*]; S. Bustamante[a]; E. Mosquera-Vargas[a,c]; J.A. Tabares[c,d]; L.A Rodríguez[a,c]; L. Marín[b,c*]

[a] Grupo de Transiciones de Fase y Materiales Funcionales (GTFMF), Departamento de Física, Universidad del Valle, Cali A.A. 25360, Colombia

[b] Grupo de Película Delgadas (GPD), Departamento de Física, *Universidad del Valle*, Cali A.A. 25360, Colombia

[c] Centro de Excelencia en Nuevos Materiales (CENM), *Universidad del Valle*, Cali A.A. 25360, Colombia

[d] Grupo de Metalurgia Física y Teoría de Transiciones de Fase (G.M.T.F), Departamento de Física, *Universidad del Valle*, A.A. 25360, Cali, Colombia

* juan.felipe.portilla@correounivalle.edu.co; marin.lorena@correounivalle.edu.co

Palabras Claves:

Resumen

Los nanotubos de carbono (NTC) son alótropos del carbono como el grafito y el diamante, que fueron descubiertos accidentalmente por S. Iljlma [1]. estos materiles carbonosos tienen gran importancia en el ámbito de la nanotecnología [1]. Los NTC pueden ser usados en diversas aplicaciones como en el campo de la electrónica y computación, tecnología fotovoltaica, diseño de electrodos, reforzamiento de materiales, remediación ambiental, y medicina, para nombrar algunos [2]. Este trabajo se enfocó explorar una aproximación económica y sostenible para la fabricación de NTC utilizando residuos plásticos, específicamente PET-Ámbar de envases de Pony Malta, mediante el método de pirólisis térmica. Como sustrato, se empleó cobre reciclado de sellos de vacío para generar bloques, cintas y películas delgadas. Se estudió el efecto de la temperatura en la pirólisis y la morfología del sustrato en el crecimiento de los NTC mediante microscopia electrónica de barrido, FTIR y espectroscopia Raman. Los resultados a 700°C muestran que las cintas y bloques de cobre promovieron nanoestructuras con morfología irregular (ver Figura 1, a) y en las películas no se percibieron; no hubo densidad en la presencia de estos y por ello la dificultad de verlos, mientras que a 800°C las películas delgadas de cobre propiciaron la formación de nanotubos rectos, en los bloques se observó la presencia de nano hilos y en las cintas tipo tip-growth (ver figura 1, b-c-d, respectivamente). Estas variaciones en la morfología de los NTC nos revelan como una posible ruta para la fabricación de una forma específica de nanotubos puede ser ajustada por la morfología del soporte donde crecen.

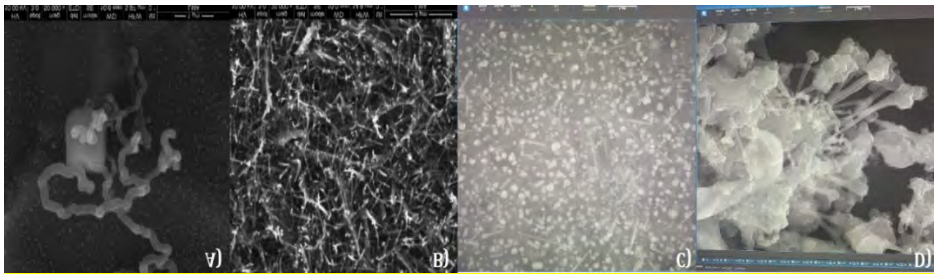


Figura 1. Imágenes TEM de NTC.

[1] Shoukat, R.; Khan, M. I. Carbon Nanotubes: A Review on Properties, Synthesis Methods and Applications in Micro and Nanotechnology. https://doi.org/10.1007/S00542-021-05211-6

[2] Market and market, 2018. Bioplastics & Biopolymers Market.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-279-O PREDICCIÓN DE LA POSIBLE RUTA DE DEGRADACIÓN DEL SULFAMETOXAZOL A PARTIR DE LOS PRODUCTOS GENERADOS EN UN SISTEMA UV/H2O2/CL2

Predicción de la Posible Ruta de Degradación del Sulfametoxazol a Partir de Los Productos Generados en un Sistema UV/H_2O_2/Cl_2

Marcela Gómez-Gómez[a], Natalia R. González-Cogua[a], Diana Martínez-Pachón[a], Alejandro Moncayo-Lasso[a]*

[a] *Grupo de investigación en Ciencias Biológicas y Químicas, Universidad Antonio Nariño, Colombia*
** Autor de correspondencia: amoncayo@uan.edu.co*

Palabras Claves: Antibiotico, Productos de Degradación, Cromatografía Líquida-Espectrofotometría de Masas de Triple Cuadrupolo LC-MS/MS, Sistema Electroquímico

En este estudio, se llevó a cabo la degradación del antibiótico sulfametoxazol (SMX) empleando un sistema UV/H_2O2/Cl_2 asistido electroquímicamente en celda de flujo con un ánodo dimensionalmente estable y un cátodo de difusión de gas, bajo radiación UV (luz de emisión de diodos) y la determinación de los posibles productos de degradación (DPs) mediante cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas de triple cuadrupolo (LC-MS/MS). Los resultados muestran la completa degradación del SMX (Co=10 mg/L) después de dos minutos de tratamiento y un porcentaje de mineralización del 35% en treinta minutos, lo cual sugiere la posible presencia de productos de degradación generados durante el proceso. El análisis LC-MS/MS de las muestras tratadas en diferentes tiempos, permitió la identificación de diez posibles DPs que generados como resultado de las vías de escisión del enlace sulfonamida y la fotoisomerización mediante el reordenamiento del anillo de isoxazol (Figura 1). Adicionalmente, se estableció su posible toxicidad mediante protox_II, toxtree, chemspider entre otras plataformas, teniendo en cuenta las posibles estructuras de los DPs identificados y se encontró que estos pueden ser más tóxicos que el compuesto original, lo que resalta la importancia de considerar la formación y toxicidad de los DPs en los procesos de tratamiento de contaminantes. Estos hallazgos indican la necesidad de considerar tiempos de tratamiento más prolongados o posibles combinaciones con otros sistemas, como los biológicos, para mitigar los posibles riesgos ambientales o de la salud.

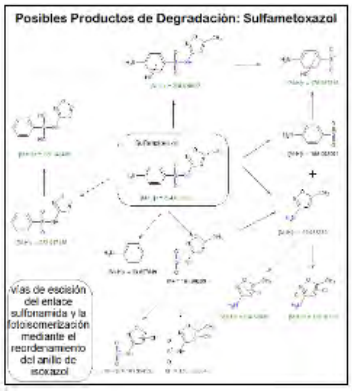


Figura 1. Posibles vías de degradación del SMX utilizando el sistema UV/H_2O_2/Cl_2 asistido electroquímicamente en celda de flujo.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Cinética de la producción de biogas generado por biodigestión anaeróbica de Excretas Porcinas en Prototipos biodigestores de laboratorio

Jairo Granados [a*], **Diego Abril** [a], **Andrés Mogollón** [a]

[a]Departamento de Química, Universidad de Cundinamarca, Facultad de Ciencias Agropecuarias, GRIPEPZ, SISPROS, Campus Fusagasugá, Cundinamarca, Colombia

Autor para correspondencia: jegranados@ucundinmarca.edu.co

Introducción: La biodigestión anaeróbica es un proceso bioquímico natural, mediante el cual materiales orgánicos complejos son desdoblados por algunas comunidades microbianas para producir biomoléculas elementales y biogás, en ausencia de oxígeno, el proceso se lleva a cabo en cuatro etapas: hidrólisis, acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis. ; La generación de CH_4 puede ser seguida por análisis y modelos cinéticos como los de Gompertz y Monod (B. Deepanraj, *et al*, 2015). **Objetivo**: evaluar el comportamiento cinético de los biogases: CH_4, CO_2, H_2S, producidos por biodigestión anaeróbica de excretas porcinas tratadas con inóculo microbiano, utilizando modelos cinéticos de Gompertz y Monod. **Métodos**: Se trabajó con datos recolectados en campo de un biodigestor de geomembrana instalado en un predio cercano a Fusagasugá y con tres prototipos de biodigestores ubicados en laboratorio, cuyos afluentes fueron excretas porcinas e inóculo bacteriano (IB), el monitoreo de la producción de biogás se realizó mediante un termohigrómetro digital y un medidor de gas multiparamétrico A-ALT5X-ALKB. **Resultados**: Se encontraron diferencias significativas ($p<0.05$) entre los parámetros cinéticos evaluados, expresados a través de los modelos cinéticos trabajados, esto es atribuible al control de variables como: Tipo y composición del afluente, temperatura del biodigestado, Evolución del pH y DQO. **Conclusión**: El mejor comportamiento cinético se observó en el biodigestor PLT3 como se puede apreciar en las figuras 1 y 2; adicionalmente, el volumen acumulado de biogás y CH_4 en el tiempo, fueron explicados adecuadamente por modelos cinéticos de Gompertz. y Monod

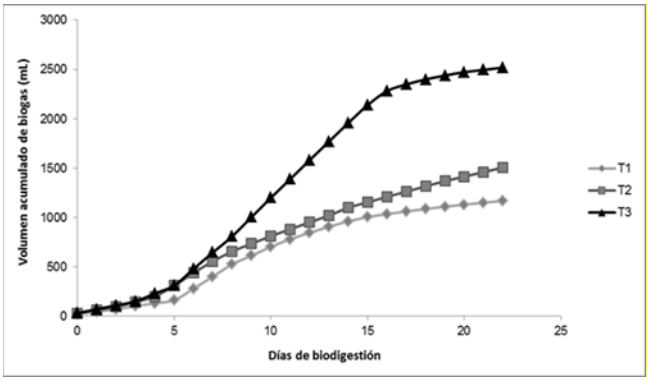


Figura 1 Análisis comparativo del Comportamiento de la producción acumulada de biogás (mL) para los tres (3) prototipos de biodigestores evaluados en el laboratorio.

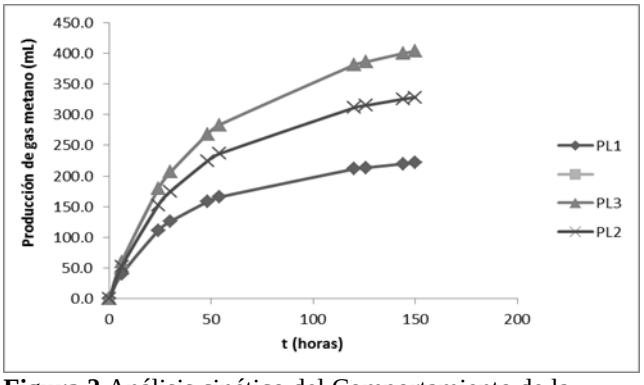


Figura 2 Análisis cinético del Comportamiento de la producción de CH_4 para los tres (3) prototipos de biodigestores evaluados en el laboratorio

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Depolimerizacion de PET-posconsumo con propilenglicol empleado un catalizador derivado de una hidrotalcita a base de NiZnAl

Will Bautista-Berrio [a], Jhon Pineda-Gomez [a], Johana Rodriguez-Ruiz [b], Edgardo Meza-Fuentes [a]*,

[a] *Grupo de Estudios en Materiales y Combustibles, Universidad de Cartagena, Colombia*
[b] *Centro Para la Industria Petroquímica-SENA, Cartagena, Colombia*

Palabras Claves: PET; hidrotalcita, depolimerización, diseño factorial.

El uso extendido de politereftalato de etileno (PET) en envases para bebidas refrescantes y agua, además de otros productos, ha conducido a la acumulación de grandes cantidades de PET-posconsumo, lo cual es dañino para el medio ambiente. Ante estas circunstancias se hace necesario el empleo de métodos de depolimerización del PET usado, de manera a ser empleado nuevamente en la industria alimenticia. En este contexto, las reacciones de glicolisis con dioles son una alternativa que permite la obtención de monómeros que se pueden emplear para la nueva síntesis de polímeros. En este trabajo se usó el propilenglicol para la glicolisis de PET-posconsumo. La reacción fue catalizada empleando un material obtenido de la calcinación de una hidrotalcita a base de NiZnAl, la cual fue calcinada a 500 °C. Los materiales empleados fueron caracterizados por termogravimetría, espectroscopia infrerroja con Transformada de Fourier, medida de área superficial especifica y difracción de rayos X. La reacción fue estudiada a través de un diseño factorial 3^{3-1}, teniendo como variables la relación solvente(mL)/PET(g) (30/10, 40/10 y 50/10), la cantidad de catalizador (0,025, 0.05 y 0.075) y la temperatura de reacción (160, 170 y 180 °C). Los resultados mostraron que los mayores porcentajes de depolimerización se consiguen a 180 °C y relación solvente/PET de 3/1 (Figura 1). Todos los monómeros obtenidos mostraron bandas por espectroscopia infrarroja características del monómero bis-hidroxipropiltereftalato (BHPT). De manera a optimizar el proceso de degradación de PET se realizaron dos experimentos a 180 °C en los que se aumentó la cantidad de solvente y de PET (280mL/70g y 300mL/60g) y de catalizador (0.2 g) para determinar el impacto en la reacción al aumentar la cantidad de reactivos, encontrándose que para la relación 280mL/70g la degradación fue 76,6 % mientras que para la relación 300mL/60g fue de 99,6 %, lo que indica que la reacción mantiene altos porcentajes de degradación inclusive al aumentar los materiales de partida.

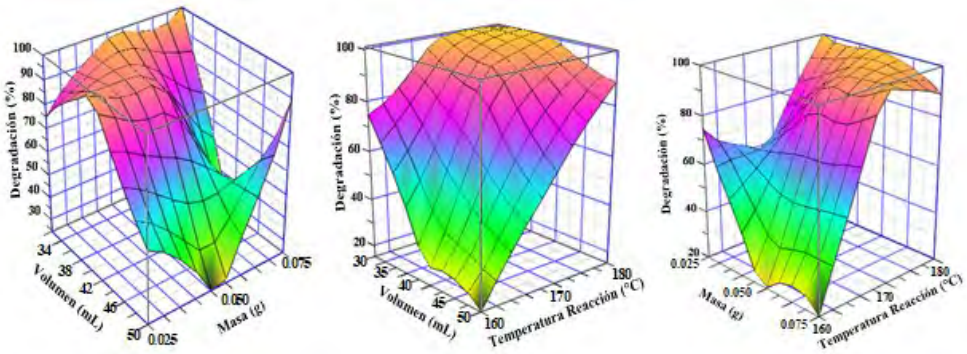


Figura 1. Porcentajes de degradación de PET en función de la temperatura, cantidad de solvente y masa de catalizador.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Adsorción de Sulfato por Efecto Memoria de una Hidrotalcita Soportada en Carbón Activado

Wilmer Orozco-Cruz [a], **Ivan Baena-Cogollo** [a], **Dayana Guzman-Vega** [a], **Edgardo Meza-Fuentes** [a]*

[a] *Grupo de Estudios en Materiales y Combustibles, Universidad de Cartagena, Colombia*
* *Autor de correspondencia: emezaf@unicartagena.edu.co*mailto:email@xxx.yyy.zzz

Palabras Claves: Sulfato; remoción; hidrotalcita; carbón activado.

El anión sulfato en efluentes acuosos puede producir efectos nocivos en la salud de niños y personas mayores, adicionalmente esta especie puede reducirse en los cuerpos de agua a sulfuro de hidrogeno, el cual es altamente tóxico, por lo que su remoción es un asunto de alto interés en las empresas de distribución de agua potable. En este trabajo se sintetizo una hidrotalcita a base de Mg-Al al interior de los poros de carbón activado. Este sistema fue sometido a calentamiento a las temperaturas de 300, 350 y 400 °C, de manera a descomponer la hidrotalcita en MgO y óxidos u oxihidróxidos de aluminio, y proporcionarle al sistema la capacidad de adsorber aniones por el efecto de memoria que le permite a las hidrotalcitas la recomposición de su fase, empleando en este caso al sulfato como anión compensador. La adsorción de los materiales calcinados se evaluó empleando soluciones a 50, 100 y 150 ppm del anión sulfato a través de turbidimetría. El material sin calcinar se evaluó por técnicas termogravimétricas (TGA-DSC), espectroscopia infrarroja (FTIR) y difracción de rayos X (DRX). Los materiales calcinados se caracterizaron por FTIR y DRX. La presencia de la fase hidrotalcita fue confirmada por DRX, especialmente a través de los picos (*0 0 3*) y (*1 1 0*). Con relación a los grupos asociados a esta fase se determinaron por FTIR vibraciones atribuibles al anión carbonato, moléculas de agua interlaminares y grupos hidroxilo. En los materiales calcinados se observaron picos atribuibles a la fase MgO, lo que indica que el proceso de calentamiento condujo a la descomposición de la hidrotalcita presente en el carbón activado. La figura 1 muestra los gráficos de adsorción de los materiales calcinados, observándose que todos los materiales retuvieron el anión sulfato y que la remoción fue superior al 95 % en todos los casos.

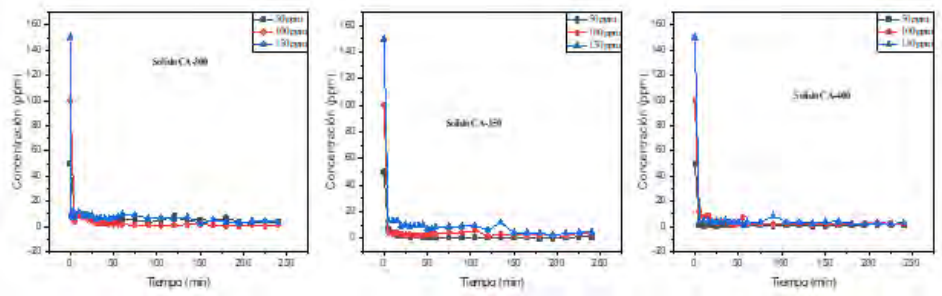


Figura 1. Curvas de remoción del anion sulfato de soluciones a 50, 100 y 150 ppm, por los solidos calcinados a 300, 350 y 400 °C

Referencias

Castellar-Arroy, E., Solano-Polo, C., Rodríguez-Ruiz, J., Espinosa-Fuentes, E., Meza-Fuentes, E. Structural study of the hydrotalcite-carbon composite and its use for the removal of aqueous sulfate. *Desalination and Water Treatment*. 2021, 213, pp. 303–310.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-366-O ***IMPLEMENTACION DE UN SISTEMA FOTO-ELECTRO-FENTON PARA LA REMOCION DE COMPUESTOS FARMACÉUTICAMENTE ACTIVOS PRESENTES EN AGUA DE RIEGO DE SABANA DE BOGOTA.***

IMPLEMENTACION DE UN SISTEMA FOTO-ELECTRO-FENTON PARA LA REMOCION DE COMPUESTOS FARMACÉUTICAMENTE ACTIVOS PRESENTES EN AGUA DE RIEGO DE SABANA DE BOGOTA.

Carlos A. Delgado - Vargas, Johan S. Barreneche - Vasquez, Natalia Gonzáles - Cógua, Ana María Botero – Coy, Félix Hernández, Diana Martínez – Pachón, Alejandro Moncayo – Lasso*

Grupo de Investigación en Ciencias Biológicas y Químicas,
Departamento de Química, Universidad Antonio Nariño,
Cra. 1 Este #47a15, Bogotá
amoncayo@uan.edu.co

Palabras Claves: Sistema FotoElectro-Fento Tratamiento de aguas, optimización, compuestos farmacéuticamente activos.

Se realizó un estudio para evaluar la eficiencia de un sistema foto-electro-Fenton (FEF) en la eliminación de compuestos farmacéuticamente activos (CFAc) presentes en muestras de agua utilizadas para riego en cultivos ubicados en la sabana de Bogotá, Colombia. El sistema FEF estaba compuesto por un ánodo dimensionalmente estable (DSA), un cátodo de difusión de gas (GDE) y se utilizó irradiación con luces LED en el rango de 390-400 nm. En una etapa inicial, se optimizaron los parámetros relacionados con densidad de corriente, flujo y concentración del electrolito soporte utilizando la metodología conocida como superficie respuesta (RSM). Posteriormente, se empleó el sistema FEF optimizado para evaluar la capacidad para remover siete CFAc específicos detectados previamente en las aguas utilizadas para riego: carbamazepina (CBZ), sulfametoxazol (SMX), ciprofloxacina (CIP), claritromicina (CLR), diclofenaco(DCF), valsartán (VAL) y trimetoprim (TMP). Los resultados obtenidos mostraron una reducción superior al 90% respecto a las concentraciones iniciales para CBZ, SMX, CIP, CLR y TMP después de 60 minutos del tratamiento. En cambio, DCF y VAL mostraron aumentos temporales durante los primeros minutos debido posiblemente a la ruptura complejos conjugados formados entre los fármacos y materia orgánica presente que posteriormente liberan estos compuestos. Sin embargo, fueron eliminado satisfactoriamente tras 60 minutos de tratamiento. Los resultados indican que el sistema FEF propuesto podría ser una opción prometedora para la eliminación de CFAc en aguas reales utilizadas para riego, lo cual ayudaría a reducir los posibles riesgos asociados con la reutilización de agua contaminada en agricultura, manteniendo así la calidad del medio ambiente y de los cultivos.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-377-O CARACTERIZACIÓN MINERALÓGICA Y FISICOQUÍMICA DE ARCILLAS DE REFERENCIA COMO BASE PARA LA EVALUACIÓN DEL POTENCIAL DE MATERIALES ARCILLOSOS EN APLICACIONES AMBIENTALES.

Caracterización Mineralógica y Fisicoquímica de Arcillas de Referencia como Base para la Evaluación del Potencial de Materiales Arcillosos en Aplicaciones Ambientales.

Madelen Pérez[a]*; Gina F. Almeida[a]; Tania G. Palacios[a].

[a] *Grupo de Geoquímica Inorgánica y Ambiental, Servicio Geológico Colombiano, Colombia.*

**Autor de correspondencia*: mperezcano@sgc.gov.co

Palabras claves: materiales arcillosos; capacidad de intercambio; caracterización de arcillas; remediación ambiental.

Los materiales arcillosos cumplen un papel importante en la protección del medio ambiente. Las características fisicoquímicas que presentan como la adsorción, la capacidad catalítica, el intercambio iónico, entre otras, los convierten en una alternativa natural disponible como agentes de limpieza ambiental para la retención y eliminación de metales pesados, la remediación de cuerpos de aguas y de suelos contaminados.

Esta investigación compila los resultados de la caracterización mineralógica y físicoquímica de 17 arcillas naturales de referencia distribuidas por *The Clay Minerals Society* y *Natural Bureau of standards.* Esta información sirve como base para analizar materiales arcillosos provenientes de diferentes zonas del país y para generar nuevo conocimiento que contribuya a la búsqueda de posibles aplicaciones de las arcillas, orientadas a afrontar los retos en el saneamiento ambiental y en la agricultura sostenible.

Se analizaron arcillas clasificadas como: caolinitas, esmectitas dioctaedrales, esmectitas dioctaedrales/trioctaedrales, micas-cloritas, paligorskita-sepiolita y otras. Se caracterizaron por análisis termogravimétrico con calorímetría diferencial de barrido (TGA-DSC), difracción de rayos X (DRX), fluorescencia de rayos X (FRX), espectroscopia infrarroja (FTIR), entre otras técnicas analíticas.

Los análisis térmogravimétricos muestran las pérdidas características de los minerales arcillosos: del agua superficial adsorbida, del agua del espacio intercapas y de las deshidroxilaciones en la estructura. Las curvas de calorimetría diferencial de barrido (DSC) evidencian los eventos endotérmicos asociados a las pérdidas y los exotérmicos asociados a la cristalización y formación de nuevas fases. A través de DRX se identifican los minerales arcillosos presentes y se observa que las muestras son de alta pureza ya que las fases minoritarias no superan el 10% de la concentración por muestra. La composición elemental reportada por FRX contrasta con la información obtenida por DRX. En FTIR se observan las bandas características asociadas a los estiramientos de los enlaces O-H, Si-O, Al-Si-O, Si-O-Si, entre otros, los cuales son característicos de los minerales arcillosos identificados.

Los resultados obtenidos por las técnicas analíticas utilizadas e integrados con los datos de la capacidad de intercambio catiónico de las arcillas objeto de estudio, nos indican la viabilidad del uso de estas arcillas en aplicaciones de remediación ambiental.

XIII-379-O ESTUDIO ISOTÓPICO DE CARBONO (Δ13C) EN MATERIAL PARTICULADO PM2.5 COLECTADO SOBRE FILTROS DE CUARZO PARA EVALUAR EL ORIGEN DE LA CONTAMINACIÓN ATMOSFÉRICA DEL VALLE DE ABURRÁ

Estudio Isotópico de Carbono ($\delta^{13}C$) en Material Particulado PM2.5 Colectado Sobre Filtros de Cuarzo para Evaluar el Origen de la Contaminación Atmosférica del Valle De Aburrá

Andrea E. Rocha [a]*, Maribel Moreno [a]. Miryam Gómez Marín[b]

Autor Correspondencia: **aerocha@sgc.gov.co*

[a] *Grupo de Investigación y Aplicaciones Nucleares y Geocronológicas (GIANG), Dirección de Asuntos Nucleares, Servicio Geológico Colombiano, Colombia*

[b] *Grupo GHYGAM, Facultad de Ingeniería, Politécnico Colombiano Jaime Isaza Cadavid, Colombia*

Palabras Claves: Isótopos Estables. Material Particulado. IRMS. Fuentes de contaminación.

Una gran variedad de elementos de la tabla periódica posee dos o más isótopos estables, átomos no radioactivos de un elemento químico que tiene el mismo número de protones, pero diferente número de neutrones. Las relaciones isotópicas más importantes son las de los elementos ligeros (C, H, O, N y S), debido que poseen características que hacen que sean fácilmente cuantificables (elementos con baja masa atómica, diferencia de masa grande entre sus isótopos y formación de enlaces covalentes).

Dentro de las aplicaciones más importantes que se encuentran para las determinaciones isotópicas se destacan los estudios ambientales de material particulado proveniente de diferentes fuentes de combustión, como son los combustibles fósiles, la quema de biomasa, carbono orgánico (OC) y carbono elemental (EC) provenientes de la formación de otros procesos en la atmósfera. El OC y EC son las especies de carbono que están presentes en mayor cantidad en las partículas finas $PM_{2.5}$. Este tipo de partículas es grandemente estudiado ya que representan efectos adversos para la salud e impactos climáticos importantes. Por medio de isótopos estables de carbono ($\delta^{13}C$) es posible obtener información sobre las posibles fuentes de partículas finas de aerosol carbonoso $PM_{2.5}$. Los valores isotópicos proporcionan información de las contribuciones de las posibles fuentes antropogénicas generadas en una zona determinada de estudio.

La caracterización isotópica de material particulado se realiza por medio de la técnica Espectrometría de Masas de Relaciones Isotópicas (IRMS), en donde se analizaron 52 muestras ambientales correspondientes a la Estación MED-BEME ubicada en la comuna 16 Belén, Barrio las Mercedes del Valle de Aburrá donde se obtuvieron relaciones isotópicas de -27,5‰ a -26,0‰ los cuales permiten predecir que el material particulado analizado es proveniente en su mayoría de una zona urbana en donde se tiene especial presencia de vehículos que funcionan a base de gasolina y diésel. los cuales son la mayor fuente de material particulado presente en la atmósfera.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Microplásticos

Andreas Reiber

Universidad de los Andes, Departamento de Química, Bogotá, Colombia

Autor de correspondencia: areiber@uniandes.du.co

Palabras Claves: Microplásticos; Contaminación; Colombia.

Los microplásticos son polímeros sintéticos sólidos, insolubles, en partículas y no biodegradables que varían en tamaño desde menos de 5 milímetros hasta 1000 nanómetros. Los microplásticos se dividen en microplásticos primarios y secundarios. Los microplásticos primarios son partículas que ya se encuentran en el rango de tamaño de los microplásticos cuando ingresan al medio ambiente. En este rango de tamaño se utiliza microplástico primario tipo A. Entre ellas se incluyen, por ejemplo, las partículas que se utilizan en las industrias de cosmética y cuidado personal. El microplástico primario tipo B se crea durante la fase de uso. Entre ellos se incluyen, por ejemplo, la abrasión de los neumáticos de los automóviles o las fibras de los textiles sintéticos que acaban en las aguas residuales durante el lavado. Los microplásticos secundarios se crean cuando las piezas de plástico más grandes se rompen durante el proceso de erosión, por ejemplo, debido al movimiento de las olas y la radiación solar. Los microplásticos están ubiquitarios en el medio ambiente y tienen alta persistencia. Acompañado a los microplásticos vienen sustancia que se han utilizado para mejorar las características fisicoquímicas y químicas de los polímeros, aditivos como plastificantes, colorantes, estabilizadores, rellenos, sustancias de reforzamiento, etc, que por si mismo pueden ser muy dañino para el medio ambiente al ser soltado en la meteorización de los plásticos. La charla presenta las características de los microplasticos y su probable amenaza para el medio ambiente.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA ANALÍTICA

IV-82-O ***DESARROLLO DE UN SISTEMA MECATRÓNICO PARA MONITOREO AMBIENTAL DE GASES DE EFECTO INVERNADERO Y COMPUESTOS ORGÁNICOS VOLÁTILES MEDIANTE SENSÓRICA Y TELEMETRÍA APLICADA A UN DRON***

Desarrollo de un Sistema Mecatrónico para Monitoreo Ambiental de Gases de Efecto Invernadero y Compuestos Orgánicos Volátiles Mediante Sensórica y Telemetría Aplicada a un Dron

Maira A Díaz [a], Juan P Arrubla [b*], Osiel Arbeláez [c], Leodilber Daza [d]

[a,b] Grupo de investigación oleoquímica, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia*
[c, d] Grupo de investigación mecabot, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia
**Autor de correspondencia: juanpablo77@utp.edu.co*

Palabras Claves: COVs; GEI; HS-SPME; GC-MS; Dron.

Las nuevas tecnologías como el Machine Learning, la Inteligencia Artificial (IA), el Internet de las Cosas (IoT) y los drones están transformando la vida cotidiana. Una de las innovaciones con mayor potencial son los vehículos aéreos no tripulados, comúnmente conocidos como drones. Entre sus aplicaciones más prometedoras se encuentra el monitoreo de gases de efecto invernadero (GEI) [1], siendo uno de sus principales contribuyentes, los vertederos de basura, donde se depositan los residuos sólidos urbanos (RSU) que, debido al crecimiento de la población, la creciente urbanización y el desarrollo socioeconómico representan un desafío para los países en vía de desarrollo [2].

La Asociación Internacional de Residuos Sólidos utiliza diversos métodos para la determinación de GEI, donde la mayoría requiere monitoreo y mediciones in situ, cuyas dificultades se centran en sus altos costos, la inseguridad para acceder a puntos de muestreo y la necesidad de infraestructura física y técnica [3,4].

El presente proyecto diseñó un sistema mecatrónico para monitoreo ambiental de GEI (CO_2, CH_4 y N_2O) mediante sensórica y telemetría e implementó un dispositivo de acoplamiento para las fibras de SPME a un dron, cuyos resultados fueron analizados por medio de GC-MS, con el propósito de obtener una herramienta asequible que disminuya costos de monitoreo y permita acceder a puntos de muestreo de difícil acceso para el inventario de GEI en vertederos de cielo abierto.

[1] Burgués, J. and Marco, S., Science of The Total Environment, 2020 Article 141172
[2] Salmerón, Y. et al., Revista Iberoamericana de Ciencias, 2017 (2334-2501)
[3] Wich, S. and Pin, L., Mapping and Monitoring Biodiversity vol. 26, 2012 (29-33)
[4] Curry, J. et al., Bulletin of the American Meteorological Society vol. 85 N°12, 2004 (1855-1861)

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-83-O ANÁLISIS DE CONTAMINANTES EMERGENTES TIPO PRODUCTOS FARMACÉUTICOS Y DE CUIDADO PERSONAL EN PESCADO RHAMDIA WAGNERI MEDIANTE MSPD/GC-MS

Análisis de Contaminantes Emergentes tipo Productos Farmacéuticos y de Cuidado Personal en Pescado *Rhamdia Wagneri* mediante MSPD/GC-MS

Danna S Fajardo [a], **Juan P Arrubla** [b*]

[a] *Grupo de investigación oleoquímica, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia*
[b*] *Grupo de investigación oleoquímica, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia*
**Autor de correspondencia: juanpablo77@utp.edu.co*

Palabras Claves: *Rhamdia Wagneri*, PPCPs, MSPD, GC-MS.

Los productos farmacéuticos y de cuidado personal (PFCP) son sustancias consumidas en altos volúmenes por la sociedad moderna, llegando luego de su uso hasta el ecosistema, convirtiéndose en contaminantes emergentes (CE) que son las sustancias cuya presencia se ha demostrado en los recursos hídricos y se han identificado como un riesgo potencial para la salud pública o ambiental, debido principalmente a su efecto sobre el sistema endocrino de las especies expuestas. Además de los PFCP existen otros CE como, plastificantes, retardantes de llama, y pesticidas [1].

Los PFCP representan creciente preocupación para la comunidad científica, además de ser tóxicos en algunos peces pueden desarrollar anormalidades de los otolitos de los embriones o llevar a producción de óvulos femeninos en peces machos, también producen una inhibición de sus movimientos llegando a alterar funciones motoras, incluso llevando a extinción [2][3].

Para el pescado, en Colombia la resolución 122 del 2012 establece los límites máximos permisibles para metales pesados, pero para otros elementos tóxicos no se han establecido niveles máximos. Algunos estudios realizados indican la presencia de metales pesados en agua y peces [4][5], evidenciado la bioacumulación que se genera [6]; sin embargo, para los PFCP es escasa la información a nivel nacional e internacional, existe vacío de conocimiento debido al escaso interés o la ausencia de metodología y técnicas para la determinación de estas sustancias dados los niveles de detección tan bajos que se requieren y la complejidad de la matriz.

La presente investigación desarrolló una metodología por dispersión de matriz en fase sólida (MSPD) y cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS) para la extracción y determinación de CE tipo PFCP en *Rhamdia Wagneri* del río Cauca. Los analitos analizados en pescado fueron bisfenol A, 17-etinilestradiol, dihidrojasmonato, ibuprofeno, naproxeno, galaxolida, tonadolida, cafeína y paracetamol, los cuales muestran límite de cuantificación entre 0,8125-0,3363 ppm, y límites de detección entre 0,2437-0,1009 ppm y porcentajes de recuperación entre 48,87-77,89 % se logra identificar la presencia de analitos como galaxolida y tonalida con concentraciones entre 0,63-2,04 ppm en pescados. Siendo un aporte significativo dada la novedad del reporte a nivel nacional e internacional como aporte al congreso colombiano de química.

[1] Raghav, M., Eden, S., Mitchell, K. y Witte, B. (2013). Arroyo 2013
[2] Wit et al., General and comparative endocrinology vol.162 N° 2, 2010 (190-201)
[3] Al-ansari et al., Enviormental Pollution vol. 158 N° 8, 2010 (2566-2571)
[4] Granada Grisales, N., & Escobar López, D. F. Repositorio UTP (2012)
[5] Arrubla et al., Ingeniería e Investigación vol. 36 N° 1, 2016 (70-78)
[6] Xiao et al., Journal of Agricultural anf Foof Chemistry vol.69 N° 51, 2021 (15738-15745)

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-84-O DETECCIÓN DE (1-[(2-CLOROFENIL) (METILIMINO) METIL] CICLOPENTANOL COMO PRECURSOR DE KETAMINA EN MUESTRAS DE LA DROGA ILÍCITA "TUCIBI"

Detección de (1-[(2-clorofenil) (metilimino) metil] ciclopentanol como Precursor de Ketamina en Muestras de la Droga Ilícita "Tucibi"

Dennis M. Ocampo [a]*, William F. Garzón [b], Fabian Parada [c]

[a] *Centro Internacional de Estudios Estratégicos contra el Narcotráfico, Policía Nacional de Colombia, Colombia*
[b] *Grupo de Investigación en Drogas de Abuso, Fiscalía General de la Nación, Colombia*
[c] *Grupo de Investigación en Química de Alimentos, Universidad Nacional de Colombia, Colombia*
**deocampoc@unal.edu.co*

Palabras Claves: droga; ketamina; precursor y tucibi

De acuerdo con el reporte de 2022 de las Naciones Unidas: *"Tuci", "happy water", "k-powdered milk" – is the illicit market for ketamine expanding?*, el Gobierno de China ha venido reportando un aumento significativo en la detección de laboratorios clandestinos para la fabricación ilícita de ketamina encontrando precursores intermedios como el 1-[(2-clorofenil) (metilimino) metil] ciclopentanol también conocido como "hidroxilamina", considerando un alto riesgo de que este conocimiento técnico se extienda hacia otros países [1].

En Colombia es cada vez más común el tráfico y comercialización ilícita de la droga denominada "Tucibi", la cual tiene como compuesto psicoactivo principal la ketamina, junto con otros adulterantes y diluyentes como el 3,4-metilendioximetanfetamina (MDMA), o "éxtasis", metanfetamina, cafeína entre otros. Sin embargo hasta el momento lo que han detectado las autoridades es el desvío de la ketamina de producción farmacéutica como insumo principal para la fabricación del "Tucibi".

A través de un muestreo de incautaciones de drogas sintéticas ilícitas en Colombia, en los años 2021-2022, se detectaron, mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC/MS); 93 muestras de "tucibi" con presencia de ketamina, de las cuales se identificaron 73 muestras con hidroxilamina. Mediante comparación de los análisis por GC/MS de diferentes presentaciones de ketamina de producción farmacéutica donde se observó la ausencia de la hidroxilamina, se platea el posible uso de ketamina fabricada clandestinamente a partir de precursores (como lo advierte el informe de las Naciones Unidas), para la producción de la droga ilícita "tucibi" que se trafica en Colombia.

[1] UNODC, «"Tuci", "happy water", "k-powdered milk" – is the illicit market for ketamine expanding?», Vienna, 2022.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-268-O ***CAROTENOID-TARGETED METABOLOMICS DE STAPHYLOCOCCUS AUREUS MEDIANTE LC-MS/MS: METABOLITOS ASOCIADOS CON TOLERANCIA AL ESTRÉS OXIDATIVO Y ADAPTACIÓN HOMEOVISCOSA***

Carotenoid-Targeted Metabolomics de *Staphylococcus aureus* Mediante LC-MS/MS: Metabolitos Asociados con Tolerancia al Estrés Oxidativo y Adaptación Homeoviscosa

Gerson-Dirceu López [a,b,c], Elizabeth Suesca [b], Jessica Múnera-Jaramillo [d], Gerardo Álvarez-Rivera [e], Elena Ibáñez [e], Alejandro Cifuentes [e], Marcela Manrique-Moreno [d], Joseph Lorent [f], Chad Leidy [b], Chiara Carazzone [a]

[a] *PhysCheMath Research Group, Universidad de América, Colombia*
[b] *Laboratory of Advanced Analytical Techniques in Natural Products, Universidad de los Andes, Colombia*
[c] *Biophysics Group, Universidad de los Andes, Colombia*
[d] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia, Colombia*
[e] *Laboratory of Fodoomics, Institute of Food Science Research, CSIC, Spain*
[f] *Louvain Drug Research Institute, Université Catholique de Louvain, Belgium*

E-mail: gerson.lopez@profesores.uamerica.edu.co

Palabras claves: *Staphylococcus aureus*, estafiloxantina, LC-MS/MS, Plasma Atmosférico Frío, tolerancia a estrés oxidativo

.

La estafiloxantina (STX) es un carotenoide derivado de un sacarolipídico producido por *Staphylococcus aureus* en su membrana bacteriana e implicado en la tolerancia al estrés oxidativo y la resistencia a péptidos antimicrobianos [1]. Además, STX está relacionada con cambios en las propiedades biofísicas de las bacterias [2,3]. Sin embargo, se desconoce cómo *S. aureus* regula la biosíntesis de STX y otros carotenoides, así como la tolerancia al estrés oxidativo de estos pigmentos. Por ende, el objetivo de esta investigación fue comprender la biosíntesis y función biofísica de estos metabolitos. Inicialmente se realizó la extracción de los pigmentos empleando un método convencional y extracción con líquidos presurizados (PLE). Posteriormente, se identificaron 34 metabolitos de la biosíntesis de STX en una cepa de *S. aureus* silvestre y se propuso una ruta biosintética alternativa para una cepa mutante empleando un método de cromatografía líquida acoplado a espectrometría de masas en tándem (LC-MS/MS). También se evaluó la capacidad antioxidante de los carotenoides bacterianos mediante análisis *in vitro* con ensayos de DPPH, ORAC lipofílico y plasma atmosférico frío (CAP), demostrando que las cepas de *S. aureus* que producen carotenoides presentaba mayor tolerancia al estrés oxidativo. El análisis de la concentración de potasio por espectroscopía de absorción atómica permitió evidenciar una menor permeabilización de la membrana bacteriana en cepas que producen carotenoides cuando fueron expuestas a CAP y la disminución de la concentración de carotenoides indicó la eficacia de CAP en la oxidación de estos metabolitos. Los resultados de espectroscopía FT-IR permitieron comprender como los STX y otros carotenoides de *S. aureus* están implicados en la adaptación homeoviscosa de la membrana, al permitir ajustar la viscosidad y permeabilidad de la bicapa lipídica de la bacteria. En conclusión, se logró dilucidar la dinámica bioquímica que ocurre durante la biosíntesis de los carotenoides de *S. aureus*, identificando la diversidad molecular de estos metabolitos y comprender como estos pigmentos están asociados con la tolerancia a condiciones de estrés oxidativo y rigidez o fluidez de la membrana de *S. aureus*.

Referencias

[1] Clauditz, A. et al., *Infect. Immun.* **2006**, 74 (*8*), 4950-4953. DOI: 10.1128/IAI.00204-06
[2] López, G.-D. et al., *Biochim. Biophys. Acta - Mol. Cell Biol. Lipids* **2021**, 1866 (*8*), 158941. DOI: 10.1016/j.bbalip.2021.158941
[3] Manrique-Moreno, M. et al. *Membranes* **2022**, 12 (*10*), 945. DOI: 10.3390/membranes12100945

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-380-O ***ESTUDIO DE COMPLEJOS COBRE-GLIFOSATO-CLORURO FORMADOS DURANTE LA DETECCIÓN ELECTROQUÍMICA DE GLIFOSATO***

Estudio de Complejos Cobre-Glifosato-Cloruro Formados Durante la Detección Electroquímica de Glifosato

Daniela Malaver-Amaya [a]*, Jorge Puello-Silva[b], Jorge Alí-Torres[b], Andrea P. Sandoval-Rojas [a]

[a] *Grupo de electroquímica y termodinámica computacional, Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia, Colombia.*

[b] *Grupo de química cuántica y computacional, Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia, Colombia.*

** Autor de correspondencia: dmalavera@unal.edu.co*

Palabras Claves: Cu-Gli; cloruros; detección electroquímica; PEDOT; Modelos computacionales.

El glifosato (Gli) es un herbicida de amplio espectro que puede producir daños al hígado, intestino delgado y a los riñones, y según la IARC hay "fuerte evidencia de que puede causar cáncer"; por lo tanto, su análisis rápido y oportuno es clave para lograr su control y evitar enfermedades. Una de las formas rápidas de detección es a través de métodos electroquímicos donde se aprovecha la formación de un complejo de coordinación cobre-glifosato.

En este estudio se realizó la detección de glifosato sobre un electrodo de carbono vítreo modificado con poli(3,4-etilendioxitiofeno) y un depósito de cobre en un regulador de fosfatos de pH 7,4, usando voltamperometría de pulso diferencial (VPD). Se encontraron dos picos de oxidación de Cu cuya corriente disminuye en presencia de Gli, así como en con de iones cloruros (Cl^-), debido a la disolución del cobre. Sin embargo, en presencia simultánea de Gli y Cl^-, la corriente en VPD de la oxidación de Cu(0) a Cu(I) aumenta y, adicionalmente, el potencial de pico se desplaza hacia potenciales más negativos, indicando la formación de complejos $Cu^{2+/1+}$-Gli-Cl^-.

Para determinar la coordinación y estabilidad de los posibles complejos se emplearon herramientas computacionales. Iniciando con una exploración conformacional de los modelos propuestos mediante *Conformer-Rotamer Ensemble Sampling Tool (CREST)* basado en los métodos xTB. Posteriormente, los mínimos hallados de cada modelo fueron evaluados en el marco de la teoría del funcional de la densidad combinado con el modelo de solvatación implícita basada en densidad. La exploración de las diferentes rutas de coordinación de los complejos Cu^{2+}-Gli mostraron que son termodinámicamente favorables con valores de ΔG_{aq} de formación negativos, siendo la coordinación tridentada de Gli la más favorecida cuando se coordina adicionalmente el Cl^- a esta estructura con un $\Delta G_{aq\text{-}global}$ = -45,0 kcal/mol.

Por lo anterior, se concluye que la presencia de iones cloruro durante la detección de glifosato es necesaria para la formación de complejos de cobre-glifosato-cloruros que permitan obtener un aumento en la señal de oxidación de cobre en el electrodo modificado; señal que puede ser usada para la cuantificación de glifosato.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-411-O APLICACIÓN DE ESPECTROMETRÍA DE MASAS EN TÁNDEM CON PLASMA DE ACOPLAMIENTO INDUCTIVO - ABLACIÓN LÁSER- ICP-MS-LA

Aplicación de Espectrometría de Masas en Tándem con Plasma de Acoplamiento Inductivo - Ablación Láser- ICP-MS-LA

Verónica Ruiz [a]*, Alejandra Álzate [b]

[ab] *Grupo de Geoquímica y Geofísica Aplicada-Dirección de Recursos Minerales, Servicio Geológico Colombiano, Colombia*

* vruiz@sgc.gov.co

Palabras Claves: Espectrometría de masas; Ablación láser; Geoquímica; Isotopía, huella digital.

La "huella digital" se fundamenta en la premisa de que el oro, asociado con un evento de mineralización específico o proceso extractivo, heredará una firma única de elementos traza de ese evento o proceso. Las asociaciones y los perfiles de estos elementos traza son únicos para cada fuente individual por lo que se les nombra como "huella digital". Con el objetivo de identificar dicha huella digital en muestras procedentes de distritos mineros de Colombia, se caracterizaron isotópicamente muestras de oro fundido, montado en resina epóxica, en la cual se aplicó la técnica analítica cuantitativa de espectrometría de masas en tándem con plasma de acoplamiento inductivo - ablación láser (LA-ICP-MS). Se utilizó material de referencia certificado NIST 610-612 y AuRm3 para control de calidad analítica del método analítico. El equipo empleado fue el ICP-MS marca Agilent modelo 8900, asociado a un láser de dímero excitado a una longitud de onda de 193 nm, marca ESI modelo NWR193.

Se analizaron muestras de dos zonas auríferas colombianas: Buenos Aires-Cauca y Marmato-Caldas. En la caracterización química se evidenciaron 11 isótopos en concentraciones menores a 1 µg/g, los cuales son diferenciadores en muestras de ambas zonas, debido a que estas poseen origen y procesos de beneficio diferentes. Los isótopos diferenciadores fueron: ^{71}Ga, ^{72}Ge, ^{93}Nb, ^{202}Hg, ^{205}Tl, ^{232}Th, ^{103}Rh y ^{56}Fe, ^{125}Te, ^{208}Pb, ^{209}Bi. Los isótopos determinados en común fueron: ^{29}Si, ^{34}S, ^{47}Ti, ^{51}V, ^{52}Cr, ^{55}Mn, ^{59}Co, ^{60}Ni, ^{65}Cu, ^{66}Zn, ^{75}As, ^{77}Se, ^{90}Zr, ^{95}Mo, ^{111}Cd, ^{115}In, ^{118}Sn, ^{121}Sb, ^{125}Te, ^{128}Te, ^{137}Ba, ^{139}La, ^{140}Ce, ^{153}Eu, ^{181}Ta, ^{182}W, ^{193}Ir, ^{195}Pt, ^{238}U. El oro de la zona Buenos Aires presenta un porcentaje de pureza de 63,03% y el oro de la zona Marmato presentó 70,65%. De acuerdo con los resultados obtenidos, se concluye que existe la probabilidad de que las muestras poseen génesis diferentes. Los procesos de beneficio encontrados en campo se verifican con la presencia de ciertos isótopos trazadores, que permanecen en las muestras analizadas. Esta caracterización isotópica, permite conocer el oro en su composición más mínima cuantificable, determinar su porcentaje de mercurio, fortaleciendo el conocimiento geoquímico que se tiene del oro colombiano y generando herramientas de trazabilidad y control de fiscalización.

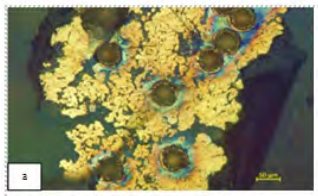


Figura 1. Post ablación en muestra de oro fundido producto de amalgama zona Buenos Aires-Cauca.

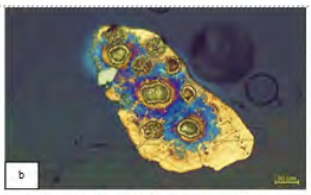


Figura 2. Post ablación en muestra de oro fundido producto de concentración por flotación zona Marmato-Caldas.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-446-O ***OPTIMIZACIÓN DE CONDICIONES PARA LA DETERMINACIÓN DE COMPUESTOS ORGÁNICOS VOLÁTILES EN THEOBROMA GRANDIFLORUM (COPOAZÚ) MEDIANTE HS-SPME-GC-MS***

Optimización de Condiciones para la Determinación de Compuestos Orgánicos Volátiles en *Theobroma grandiflorum* (Copoazú) Mediante HS-SPME-GC-MS

Mayrin O. Valencia [a,b], Chiara Carazzone [b], Gerson-Dirceu López [c], Paula Galeano [a*]

[a] *Grupo de Investigación en Productos Naturales Amazónicos (GIPRONAZ), Universidad de la Amazonia, Colombia*
[b] *Laboratory of Advanced Analytical Techniques in Natural Products (LATNAP), Universidad de los Andes, Colombia*
[c] *PhysCheMath Research Group, Universidad de América, Colombia*
***** *Autor de correspondencia: p.galeano@udla.edu.co*

Palabras claves: *Theobroma grandiflorum*; maduración; DoE; HS-SPME, GC-MS.

El copoazú (*Theobroma grandiflorum*) es una fruta exótica silvestre de la región amazónica, con gran potencial económico por sus propiedades organolépticas, bioactivas, antioxidantes y su valor nutricional. Algunas de estas propiedades son atribuidas al perfil volátil, por tanto, se considera un parámetro de calidad. El análisis de los compuestos orgánicos volátiles (VOCs) en diferentes etapas de maduración de la fruta permite identificar compuestos de interés industrial (Souza et al., 2020), que da valor agregado al fruto y podría contribuir en la producción agrícola del copoazú. Esta investigación se centró en la optimización de las condiciones para la determinación de los VOCs del copoazú mediante microextracción en fase sólida en espacio de cabeza (HS-SPME) acoplada a cromatografía de gases-espectrometría de masas (GC-MS). Las condiciones óptimas fueron aplicadas a pulpa de copoazú en tres estados de maduración. Inicialmente, se llevó a cabo análisis de: pH, sólidos solubles totales (SST), Espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier ATR-FTIR y cromatografía líquida de alta eficiencia con detector de arreglo de diodos HPLC-DAD con el fin de diferenciar los estados de maduración. Posteriormente, se realizó la optimización de las condiciones de separación cromatográfica de los compuestos orgánicos volátiles en GC-MS; el tratamiento de la muestra; cantidad de muestra y tiempo de equilibrio con la fibra de SPME. También, se evaluó las condiciones de extracción; tiempo y temperatura de exposición, a través de estrategias multivariadas de diseño de experimento (DoE). Las condiciones óptimas se establecieron mediante análisis de superficie de respuesta de las áreas obtenidas para los VOCs más representativos de la muestra. Finalmente, se identificaron los compuestos orgánicos volátiles en tres estados de maduración: medio, maduro y muy maduro. Además, se logró identificar que los VOCs principales de esta fruta corresponde a 23 alcoholes, 35 esteres, 11 terpenos, 8 éteres, 5 aldehídos, 6 cetonas, 2 ácidos, 4 aminas, 9 hidrocarburos y 7 otros. Estos resultados demostraron la variación de la composición volátil en diferentes estados de maduración del copoazú, que podría servir como un parámetro organoléptico de selección para encontrar la etapa de desarrollo rica en estos compuestos volátiles.

Referencias Bibliográficas:

Souza, F. D. C. D. A., Silva, E. P., & Aguiar, J. P. L. (2020). Vitamin characterization and volatile composition of camu-camu (Myrciaria dubia (HBK) McVaugh, Myrtaceae) at different maturation stages. *Food Science and Technology*, *41*(4), 961–966. https://doi.org/10.1590/FST.27120

IV-477-O ***EVALUACIÓN DE LA BIO-ADSORCIÓN DE COBRE, ZINC Y MERCURIO PRESENTE EN AGUA SOBRE RESIDUOS DE CÁSCARA DE PLÁTANO (MUSA PARADISIACA L.)***

Evaluación de la Bio-adsorción de Cobre, Zinc y Mercurio presente en Agua sobre Residuos de Cáscara de Plátano *(Musa Paradisiaca L.)*

Lizeth, J. Samboni[a*], Germán Cuervo[a], Tania, M. Gutiérrez[a]

Grupo de Investigación en Procesos Electroquímicos (GIPEL), Universidad del Cauca, Colombia
**Autor de correspondencia: silizeth@unicauca.edu.co*

Palabras clave: Agua., Bio-adsorción., Biomasa., Electroanálisis., Metales pesados.

Como consecuencia del auge industrial que se ha dado desde finales del siglo XIX, así como de la generación de residuos, producto de las múltiples actividades antropogénicas, las fuentes hídricas han sido fuertemente contaminadas con un gran número de sustancias químicas, entre ellas, los metales pesados. La presencia de metales pesados en agua afecta la salud de los seres vivos por su bioacumulación, su no biodegradabilidad y los graves efectos que provocan [1]. Diversas alternativas para la eliminación de metales del agua han sido propuestas, entre ellas, la técnica de bioadsorción con materiales provenientes de residuos vegetales [2]. Esta técnica ofrece eficiencia, bajo costo, facilidad de operación, posibilidad de recuperar el material bio-adsorbente, uso de biomasa, convirtiéndose en una alternativa sostenible. Este trabajo plantea el estudio de la bio-adsorción de los metales cobre, zinc y mercurio presentes en agua, empleando la cáscara de plátano *(Musa paradisiaca L.)*, con la cual se han obtenido remociones satisfactorias para los metales cadmio y plomo [3]. Se emplearon materiales provenientes de la cáscara de plátano molida a los que se realizaron pretratamientos consistentes en hidrólisis ácida, hidrolisis básica y material sin tratamiento. Se evaluó la capacidad de retención de cada metal en los tres tipos de materiales. Los mejores resultados se obtuvieron con el material sin tratamiento previo, con el cual se ejecutó un diseño experimental factorial 2^k con k=3, con puntos estrella y un punto central, cuya variable respuesta fue el porcentaje de remoción de cada metal en agua, con los factores pH, dosis del adsorbente y tiempo de contacto entre adsorbente y solución del ion metálico. Para determinar la eficiencia del proceso de adsorción de los metales en el material de la cáscara de plátano, se implementó una metodología por voltamperometría de onda cuadrada con electrodo de disco rotatorio de oro para la cuantificación de mercurio y polarografía de redisolución anódica por onda cuadrada para cobre y zinc. Se obtuvieron remociones satisfactorias para los 3 metales, con isotermas en el rango de concentración de 10 - 1000 mg/L, una máxima capacidad de adsorción de 20,81 mg/g, 26,24 mg/g y 24,75 mg/g para Cu, Zn y Hg respectivamente. Los valores de pH (3-5) y la dosis de adsorbente (0.3300 – 0.3500) g, fueron los parámetros con mayor incidencia en la remoción.

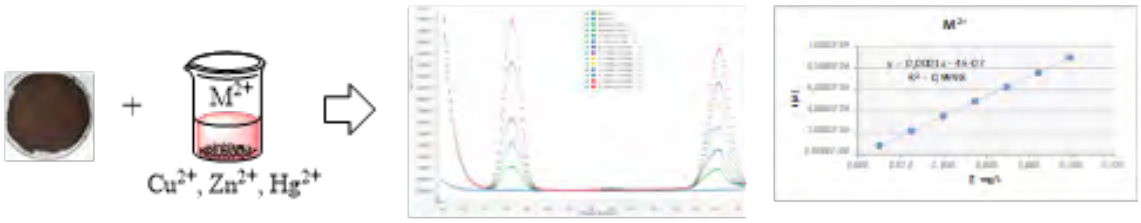


Figura 1. Estudio de la evaluación de la bioadsorción de Cu^{2+}, Zn^{2+} y Hg^{2+} presente en agua utilizando un bio-adsorbente de cáscara de plátano.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Bibliografía

[1] Phuengphai, P. Thapanee, S. Napaporn, K. Amnuay, W. (2021). *Removal of Copper (II) from aqueous solution using chemically modified fruit peels as efficient low-cost biosorbents*. Water Science and Engineering. Vol. 14. pp. 286-294. ISSN 1674-2370. https://doi.org/10.1016/j.wse.2021.08.003.

[2] Hikmatullah, A. Sayed, H. Habibullah, S. Ngambua, R. Shakeel, H. (2022). *Low cost biosorbent (Melon Peel) for effective removal of Cu (II), Cd (II), and Pb (II) ions from aqueous solution, Case.* Studies in Chemical and Environmental Engineering. vol. 6. ISSN 2666-0164, https://doi.org/10.1016/j.cscee.2022.100242.

[3] Concha, D. Oimé, J. (2023). *Evaluación de la Adsorción de Cadmio y Plomo a partir de la Cáscara de Plátano (Musa x paradisiaca L) en Fuentes Hídricas contaminadas en el Departamento del Cauca*. [Tesis de pregrado, Universidad del Cauca].

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-520-O ***USO DE UNA RAMPA LENTA DE ATOMIZACIÓN EN LA TÉCNICA DE ABSORCIÓN ATÓMICA DE HORNO DE GRAFITO DE FUENTE CONTINUA (HR-CS-GFAAS) PARA LA DETERMINACIÓN SIMULTANEA DE CD Y NI EN MUESTRAS DE CHOCOLATE EN POLVO***

Uso de una rampa lenta de atomización en la técnica de absorción atómica de horno de grafito de fuente continua (HR-CS-GFAAS) para la determinación simultanea de Cd y Ni en muestras de chocolate en polvo

Daniel E. Bustos[†, a], Juan A. Toro[†, a], Marisol Briceño [b], Ricardo E. Rivas [a*].

[a] *Grupo de Investigación Espectroscopía Analítica Aplicada, Departamento de química, Universidad de Los Andes, 111711 Bogotá, Colombia.*

[b] *Departamento de Química Analítica,, Facultad de Química, "Campus Mare Nostrum", Universidad de Murcia, E-30100 Murcia, España.*

** Autor de correspondencia: re.rivas@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: HR-CS-FGAAS; Determinación simultánea; Análisis de suspensiones; chocolate en polvo; corrección espectral; Uso de rampa lenta de atomización.

Los instrumentos de absorción atómica tradicionales con fuente de líneas (LAAS) tienen la limitación de ser equipos de análisis unielemental, requiriendo la utilización de una lámpara para la medición de cada analito presente en la muestra (determinación secuencial). En contraste, los equipos de fuente continua utilizan solo una lámpara de xenón de espectro continuo, requiriendo de un monocromador de alta resolución que permite la obtención de espectros de absorción con un ancho de banda promedio de 0,3 nm. En la vecindad de la línea analítica de cada analito, pueden distinguirse las líneas secundarias de otros elementos que pueden ser adicionalmente determinados dentro del mismo espectro. Con el uso de esta técnica se desarrolló una metodología para el análisis simultáneo (no secuencial) de Cd y Ni en muestras de chocolate en polvo, mediante la introducción de la muestra dentro del horno de grafito en forma de suspensión sólida sin requerir su digestión ácida. Una mínima cantidad del chocolate en polvo (100 mg) fue requerido para la preparación de la muestra. Ya que las volatilidades de ambos elementos son bastante diferentes, la cuantificación simultánea se logró utilizando una atomización en rampa de calentamiento lento, cubriendo un gradiente de temperatura amplio para la volatilización del Cd a bajas temperaturas y la posterior atomización del Ni a temperaturas elevadas. La exactitud y precisión arrojados por el método se confirmaron con éxito utilizando un material de referencia (NIST SRM 1573a). Los límites de detección fueron 0.027 $\mu g \cdot g^{-1}$ y 0.22 $\mu g \cdot g^{-1}$ para Cd y Ni respectivamente utilizando estándares acuosos para la calibración y la determinación simultánea de ambos elementos en una misma medición (Fig. 1). El método optimizado se utilizó para la determinación de ambos elementos en muestras reales compradas en supermercados minoristas, encontrándose concentraciones variables entre 0,5 y 5,7 $\mu g \cdot g^{-1}$ para Cd y 2,1–10,9 $\mu g \cdot g^{-1}$ para Ni.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

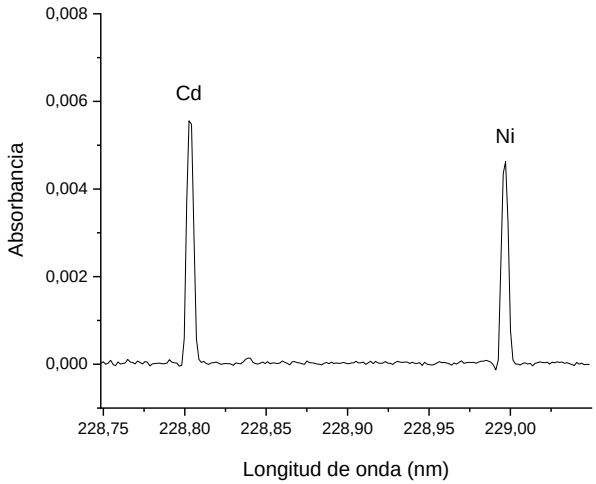


Fig 1. Espectro de líneas para la inyección en el horno de grafito de un estándar acuoso preparado simultáneamente de Cd (2 ppb) y Ni (100 ppb).

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA DE ALIMENTOS Y AGROINDUSTRIA

XIV-94-O EVALUACIÓN DEL IMPACTO DEL SECADO EN LA QUÍMICA VOLÁTIL DE PHYSALIS PERUVIANA

EVALUACIÓN DEL IMPACTO DEL SECADO EN LA QUÍMICA VOLÁTIL DE *Physalis peruviana*

Juan P. Marín[a,c]*, *Luis C. Carillo[b]*, *Edison J. Osorio[c]*, Diana C. Restrepo-Espinosa[c]

[a]Estudiante de maestría, Facultad de Ingeniería, Universidad de Antioquia, Colombia
[b]Bioingred Tech, Medellín, Colombia
[c]Grupo de Investigación en Sustancias Bioactivas GISB, Facultad de Química Farmacéutica, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia

*Autor correspondencia: juan.marin33@udea.edu.co

Palabras claves: *Physalis peruviana*; secado; SPME-GC-MS; composición volátil.

Colombia es un país biodiverso reconocido por ser productor y exportador de frutas exóticas como la Uchuva, que posee color, sabor y aroma atractivo. Sin embargo, sus propiedades organolépticas se afectan por una rápida maduración generando pérdidas y requiriendo el uso de tecnologías adicionales para su conservación. Por ello, como alternativa de conservación se evaluaron diferentes procesos de secado sobre frutos previamente caracterizados en humedad, contenido de sólidos solubles y color. Los frutos fueron sometidos a un secado convectivo (60 °C, rampa 60-40 °C), liofilización y lecho fluidizado (60°C, velocidad de fluidización de 38 m/s). El impacto de los tratamientos se analizó mediante la estimación de la química volátil que conforma este material usando cromatografía gaseosa acoplada a espectrometría de masas y micro extracción en fase sólida (SPME-GC-MS), metodología optimizada bajo un diseño de Box Behnken modificando variables como temperatura de incubación, tiempo de extracción y tiempo de desorción. Así mismo, se estimó la linealidad, límite de detección y límite de cuantificación del método con estándares de terpenos. Posterior al secado, la humedad media de equilibrio de 17.44 ± 8.92% m/m, se obtuvo a diferentes tiempos de tratamiento siendo el secado con lecho el de menor tiempo (5 h), además de la liofilización (48 h). Se obtuvieron variaciones en el color respecto al fruto fresco en donde el lecho fluidizado genera un mayor empardamiento. En el análisis de volátiles se identificaron compuestos tales como terpenos, aldehídos, ésteres, alcoholes, etc., los cuales están asociados a olores florales, frutales o herbales varían según el estado de maduración en donde moléculas como el butanoato de etilo, α-pineno, β-pineno, ocimeno, terpineno, octanoato de etilo y decanoato de etilo están en mayor presencia para un estado de madurez entre 10-11°Brix. La evaluación de la composición de volátiles de *Physalis peruviana* requiere una selección y caracterización de la fruta adecuada, toda vez que los diferentes tratamientos muestran una alta variación no atribuida exclusivamente al proceso de secado en donde el contenido de solidos solubles marca diferencia en la química volátil del material.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-98-O CONDICIONES DE EXTRACCIÓN Y DEGRADABILIDAD DE CAPSAICINOIDES EN OLEORRESINAS DE CAPSICUM CHINENSE CON ALTO POTENCIAL AGROINDUSTRIAL.

Condiciones de Extracción y Degradabilidad de Capsaicinoides en Oleorresinas de *Capsicum chinense* con Alto Potencial Agroindustrial

Lina M. Acosta [a], **Rafael A. Chamorro** [b], **Juan F. Pineda** [b], **Guillermo L. Montoya** [b,*]

[a] *Maestría en Ciencias - Biotecnología. Universidad Icesi, Cali, Valle del Cauca, Colombia.*
[b] *Facultad de Ingeniería, Diseño y Ciencias Aplicadas. Escuela de Ciencias Aplicadas e Industria Sostenible, Departamento de Ciencias Farmacéuticas y Químicas. Universidad Icesi, Cali, Valle del Cauca. Colombia.*

** Autor de correspondencia: glmontoya@icesi.edu.co*

Palabras Claves: Capsaicinoides; oleorresina; extracción; cinética de degradación.

El *Capsicum chinense* o chile habanero es un fruto de alto valor comercial a nivel mundial debido a su amplia gama de metabolitos secundarios, entre los que se encuentran los carotenos y los capsaicinoides, los cuales le otorgan sus propiedades aromáticas, antioxidantes, antimicrobianas, de color y pungencia que lo convierten en un producto atractivo para la industria farmacéutica, cosmética, textil y agroindustrial. En Colombia, la producción y exportación de ají experimentaron un aumento del 83% en el año 2022 lo cual abre las puertas para la exploración de productos derivados como las oleorresinas. Por otro lado, en 2021, el mercado mundial de oleorresinas superó los 1700 millones de dólares y se estima que para el año 2028 supere los 2300 millones de dólares. Dicho lo anterior, la industria nacional puede aprovecharse del enorme potencial de mercado de oleorresinas para fomentar su producción y exportación.

Ahora bien, en la actualidad se han estudiado técnicas de extracción no convencionales como los fluidos supercríticos con altos rendimientos y baja residualidad de solventes orgánicos, pero el elevado costo de inversión de esta tecnología resulta excesivo para países con economías emergentes. Por ello, el uso de métodos convencionales de extracción con solventes orgánicos de baja toxicidad como el etanol (cuya industria sucro-alcoholera nacional reduce los costos de esta materia prima), sirven como una alternativa rentable para su producción. Por lo tanto, existe la necesidad de identificar condiciones óptimas aumentando rendimientos y favoreciendo procesos sostenibles y eco-amigables.

En este trabajo experimental se evaluaron parámetros como el efecto del tiempo de proceso, perfiles de distribución de tamaño de partícula, relación solvente-biomasa y diferentes métodos de filtración, empleando análisis estadísticos y metodologías analíticas convencionales. De esta manera se lograron establecer las condiciones para la obtención de oleorresinas con un alto rendimiento en capsaicinoides, se determinó además la cinética degradación de sus principales marcadores de calidad y finalmente se calculó su estabilidad en el tiempo. En conclusión, la oleorresina de ají es un producto con alto potencial para impulsar la economía nacional y los resultados experimentales obtenidos prometen productos de alta calidad y competitividad.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-99-O ***INCORPORACIÓN DE OLEORRESINA CAPSICUM EN MATRICES SÓLIDAS: UNA ESTRATEGIA PARA AUMENTAR ESTABILIDAD Y FACILITAR SU APLICACIÓN EN ALIMENTOS FUNCIONALES***

Incorporación de oleorresina *Capsicum* en matrices sólidas: Una estrategia para aumentar estabilidad y facilitar su aplicación en alimentos funcionales

Edwin, F. Revelo[a]**; Brayan, S. Sanchez** [b]**; Jose, L. Medina**[b]**; Guillermo, L. Montoya**[b]

[a] *Maestría en Ciencias - Biotecnología. Universidad Icesi, Cali, Valle del Cauca, Colombia.*

[b] *Facultad de Ingeniería, Diseño y Ciencias Aplicadas. Escuela de Ciencias Aplicadas e Industria Sostenible, Departamento de Ciencias Farmacéuticas y Químicas. Universidad Icesi, Cali, Valle del Cauca. Colombia.*

** Autor de correspondencia: glmontoya@icesi.edu.co*

Palabras Claves: Oleorresina; Granulación vía húmeda; Capsicum; Capsaicinoides; Carotenoides.

El mercado de ají a nivel mundial ha experimentado un crecimiento exponencial debido a las características nutricionales de sus componentes, pasando de producir 23 millones de toneladas en el año 2000 a más de 40 millones en el 2018 (Ordoñez & Valero, 2020). Hasta el momento, se ha reportado que este género se caracteriza por tener elevados contenidos de carotenoides y capsaicinoides, al igual que altos niveles de vitaminas, como la A, C, E, K y B6; minerales como hierro, potasio, fosforo, zinc y calcio; y aminoácidos como fenilalanina, lisina y triptófano; lo que le confiere propiedades nutricionales útiles para la elaboración de alimentos funcionales. Adicionalmente, se ha demostrado que los flavonoides en conjunto con el ácido ascórbico y cafeico se asocian con su actividad antioxidante. La obtención de oleorresina se ha convertido en una opción prometedora para incorporar los compuestos en forma de aditivo; sin embargo, su aprovechamiento se ve restringido debido a su alta degradabilidad y a los desafíos que conlleva su manipulación, almacenamiento e incorporación en diversos productos. Es por lo que la integración en matrices sólidas representa una alternativa para potenciar el uso de estos compuestos. En este estudio, se implementaron diferentes formulaciones, que utilizaron procesos de granulación por vía húmeda y encapsulación, a los cuales se les determinaron parámetros de calidad, como el ángulo de reposo, la densidad aparente, humedad y friabilidad, incluyendo la cuantificación por métodos analíticos de los principales marcadores quimio-taxonómicos. Dentro del procedimiento para obtener las matrices en estado sólido, también se evaluaron atributos críticos de proceso como la velocidad de mezclado y el tiempo de secado, que permitieron entender y determinar de forma general los procesos de degradación de los compuestos bioactivos, además del impacto que ejerce la reología del aditivo en su manipulación y almacenamiento. De esta manera, se logró identificar un mecanismo cuya formulación presenta las condiciones óptimas que permiten tener una buena vehiculización de los compuestos, disminuyendo así su degradación. Finalmente se pudo concluir que, en cuanto a los procesos de fabricación, la granulación vía húmeda mejora las propiedades de flujo frente a la encapsulación, mientras que esta última presenta una concentración más alta en comparación a la granulación vía húmeda.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Caracterización química por HS-SPME/GC-MS de los volátiles de un tipo de café especial obtenido por un beneficio similar a Honey y cultivado en la finca "La Mina" del municipio de Buesaco – Nariño - Colombia.

Cindy. E.C [a]; *Dolly M.R[b]; *Nelson. H.H[a]

[a] *Programa de Química, Universidad de Nariño, Colombia*
[b] *Programa de Biología, Universidad de Nariño, Colombia*
* nhurtado@udenar.edu.co

Palabras Claves: *Coffea arabica*; dry fermentation; compuestos volátiles; HS-SPME/GC-MS.

Resumen:

Se evaluó la composición química de los volátiles de mucílago y endospermo antes y al final del proceso de fermentación en seco, y del producto terminado (café tostado). Para la extracción de los compuestos volátiles de las muestras de café, se utilizó la Microextracción en Fase Sólida con espacio de cabeza (HS-SPME) usando fibras de diferente polaridad (DVB/CAR/PDMS; PDMS y PDMS/CAR) en condiciones estandarizadas de 71°C a 40 minutos y para la semicuantificación de sus componentes se usó cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS). Los compuestos volátiles caracterizados se relacionaron con los atributos sensoriales determinados por un panel de cuatro catadores certificados y correspondientes a Fragancia/Aroma, Sabor, Regusto, Acidez, Cuerpo, Balance, Dulzor, Taza Limpia, Uniformidad e Impresión Total. Al inicio y al final de la fermentación en seco del mucílago se identificaron 56 y 50 compuestos respectivamente, agrupados de forma principal en ácidos, alcoholes y ésteres. En el endospermo sin fermentar se identificaron 42 compuestos y en el fermentado 43, agrupados mayoritariamente en ácidos, alcoholes, aldehídos y ésteres. Finalmente, en los granos de café tostado se identificaron 55 compuestos volátiles, en mayor proporción cetonas y pirazinas, destacándose también en esta matriz la presencia de ácido acético. Los volátiles caracterizados aportan el aroma y el sabor de la taza de café Compuestos como la 2-metilpirazina son responsables de los aromas a nuez, tostado, chocolate, avellana, patata o tierra y las cetonas como 2,3-pentanodiona son responsables de notas aceitosas y caramelo[1,2]. Estos resultados permitieron establecer qué tipo de compuestos se generan durante la fermentación y el tostado de un tipo de Café de Nariño.

1. Yang N, Liu C, Liu X, Degn TK, Munchow M, Fisk I. Determination of volatile marker compounds of common coffee roast defects. Food Chem. 2016;211:206-214. doi:10.1016/j.foodchem.2016.04.124
2. Caporaso N, Whitworth MB, Cui C, Fisk ID. Variability of single bean coffee volatile compounds of Arabica and robusta roasted coffees analysed by SPME-GC-MS. Food Res Int. 2018;108(December 2017):628-640. doi:10.1016/j.foodres.2018.03.077

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-356-O EVALUACIÓN DE LA FERTILIDAD DE SUELOS DE LA ALTILLANURA COLOMBIANA EN SISTEMAS DE SOYA-MAÍZ.

Evaluación de la Fertilidad de Suelos de la Altillanura Colombiana en Sistemas de Soya-Maíz.

Víctor A. Jiménez [a]*, Raquel E. Monagas [a], Miller Mosquera, Anna P. Miranda [a], Maria N. Ortiz[a]

[a] *Laboratorio Agricola, Agropecuaria Aliar S.A., Puerto Gaitán-Meta, Colombia*
** Autor de correspondencia: victor.jimenez@aliar.com.co*

Palabras Claves: propiedades químicas, fertilidad de suelo, productividad, oxisoles

En la altillanura colombiana se tiene un potencial agrícola, debido a la temperatura, clima y la topografía, pero su productividad se ve limitada ya que los suelos de esta región son en su mayoría del orden oxisoles y se caracterizan por presentar baja fertilidad y susceptibilidad a la compactación y erosión. Además, tienen una alta acidez, altos contenidos de hierro y aluminio intercambiable, bajos contenidos de calcio, magnesio, fósforo, potasio y baja capacidad de intercambio catiónico. La empresa Agropecuaria Aliar S.A. tiene un área productiva aproximada de 40 mil hectáreas, donde se cultivan maíz y soya para la producción de más de 300 mil cerdos mensuales. Por estas condiciones es importante crear un modelo de desarrollo agrícola basado en la conservación y mejora de las propiedades del suelo y productividad. Contar durante los últimos 3 años con un laboratorio agrícola en la compañía Aliar S.A. donde diariamente se emplean análisis fisicoquímicos para caracterizar la fertilidad de los suelos en los sistemas de soya y maíz, ha permitido obtener resultados rápidos y confiables, sirviendo de soporte para la difusión de la información al área agrícola de la compañía, lo que ayuda a resolver las necesidades de optimizar el uso de correctivos y fertilizantes, y permitir al cultivo un ambiente propicio para la expresión de altos rendimientos.

Bibliografia

RAIJ, B. van; ANDRADE, J.C. de; CANTARELLA, H.; QUAGGIO, J.A. 2001. Análise Química para Avaliação da Fertilidade de Solos Tropicais. Campinas, Instituto Agronômico, 285p.

Hanyabui, E., Obeng Apori, S., Agyei Frimpong, K., Atiah, K., Abindaw, T., Ali, M., & Byalebeka, J. (2020). Phosphorus sorption in tropical soils.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-368-O ANÁLISIS COLORIMÉTRICO A PARTIR DE IMÁGENES RGB: UNA HERRAMIENTA EN PYTHON PARA LA DETECCIÓN DE CONTAMINANTES EN PLANTAS

Análisis Colorimétrico a partir de Imágenes RGB: Una Herramienta en Python para la Detección de Contaminantes en Plantas

Jhonny O. Gallego [a], * **Yulieth C. Reyes Roa** [a], **J. A. Ramirez-Rincon** [a]

[a] *Grupo de Investigación Physchemath, Universidad de América, Bogotá-Colombia*
**Autor de correspondencia*: *jhonny.osorio@profesores.uamerica.edu.co*

Palabras Claves: Colorimetría; Python; imágenes RGB; Cadmio.

Resumen

La presencia de contaminantes en plantas tales como metales pesados se han incrementado en los últimos años en respuesta a los diferentes tipos de emisiones. Dentro de las tecnologías de monitoreo se destacan los métodos electroquímicos que presentan desventajas en costo y tiempos de análisis. Las tecnologías basadas en Machine Learning y análisis de datos prometen ser una herramienta de caracterización y análisis de parámetros y elementos de interés.

Esta investigación presenta un método innovador que utiliza el análisis colorimétrico de imágenes RGB obtenidas con cámaras convencionales. Gracias al uso de Python y librerías especializadas como SAM para la segmentación semántica de imágenes, se desarrolló un software que examina las superficies foliares de las plantas para detectar contaminantes de interés. Para lograr esta detección, una vez realizada la segmentación, se aplican técnicas de normalización y procesamiento en distintos espacios de color a las imágenes. Esto facilita una conversión más precisa de las imágenes RGB al espacio de color L*a*b*, permitiendo una mayor exactitud en la identificación de cambios cromáticos en las hojas asociados a su contaminación. Durante la fase experimental se recolectaron numerosas muestras de plantas expuestas a diferentes niveles de metales pesados.

Los resultados previos indican que puede existir una correlación entre parámetros colorimétricos y contaminantes de interés. Este método ofrece múltiples ventajas, como la rapidez en el análisis, la reducción de costos y la capacidad para llevar a cabo estudios a gran escala que aporta significativamente a la problemática de seguridad alimentaria. Adicionalmente, el software creado es de código abierto y puede adaptarse fácilmente a diferentes tipos de plantas y contaminantes, lo que lo convierte en una herramienta versátil para la investigación

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Características Nutricionales y Bioactivos de la Colección Central Colombiana de *Solanum tuberosum* Grupo Phureja y de Criolla Ocarina, Criolla Sua Pa y Criolla Dorada

Carlos-Eduardo Narváez-Cuenca [a*], Teresa Mosquera [b], Clara Peña [a], Clara Piñeros-Niño [b], María Angélica Parra [b], Wilson Santiago Díaz-Bolívar [b], Séverine Thomas [c], Fabio-Alexander Cuéllar-Cepeda [a], Juan-David Vásquez-Benítez [a], Liliam Palomeque [a], Johan Urquijo [b], Johana Carolina Soto Sedano [d], Luis-Ernesto Rodríguez-Molano [b], Luz-Patricia Restrepo-Sánchez [a], Ajjamada Kushalappa [e]

[a] *Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Food Chemistry Research Group, Carrera 30 No 45-03, Bogotá, Colombia.*

[b] *Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Facultad de Ciencias Agrarias, Departamento de Agronomía, Carrera 30 No 45-03, Bogotá, Colombia.*

[c] *AgroParisTech, Paris Institute of Technology for Life, Food and Environmental Sciences, 16 rue Claude Bernard, 75005 Paris, France*

[d] *Departamento de Biología, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá, Bogotá, Colombia*

[e] *Plant Science Department, McGill University, Ste.-Anne-de-Bellevue, QC, H9X 3V9, Canada*

**Autor de correspondencia: cenarvaezc@unal.edu.co*

Palabras clave: proteína; fibra dietaria; deficiencia nutricional; fenólicos; carotenoides

La población colombiana tiene falta de ingesta de algunos nutrientes, por ejemplo, proteína, hierro, zinc y calcio y alta incidencia de enfermedad cardiovascular, relacionada parcialmente con falta de consumo adecuado de fibra dietaria. Para afrontar esta situación una solución es generar cultivares de un alimento de consumo masivo, con mayor calidad nutricional y funcional. Presentamos los resultados de varios trabajos de investigación. Se caracterizó tanto la colección central colombiana (CCC) como siete clones avanzados de *Solanum tuberosum* Grupo Phureja en sus contenidos de proteína (por Kjeldahl), fibra dietaria soluble, insoluble y total (método enzimático gravimétrico), hierro, zinc y calcio (por plasma inductivamente acoplado con espectroscopía de emisión óptica). Además, la CCC se caracterizó en su contenido de carotenoides (RP-UHPLC-DAD) y de compuestos fenólicos, incluidas antocianinas (RP-UHPLC-DAD). Se incluyeron cultivares tradicionales de papa para comparar. De otro lado, se estudió la variabilidad alélica de la colección. El estudio de la CCC permitió identificar grupos con alto potencial para desarrollar nuevos cultivares con niveles nutricionales superiores a los de los cultivares comerciales. Se identificaron diversos QTL asociados con el contenido nutricional y en bioactivos. El estudio llevó a la selección de tres clones avanzados que fueron llamados Criolla Ocarina, Criolla Sua Pa y Criolla Dorada, con mayores contenidos nutricionales que la Criolla Colombia, típicamente comercializada en Colombia.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA DE MATERIALES

V-117-O NANOCOMPUESTOS FLUORESCENTES BASADOS EN PUNTOS CUÁNTICOS DE SULFURO DE CADMIO Y MATRICES POLIMÉRICAS PARA SU APLICACIÓN COMO SENSOR VISUAL EN LA DETECCIÓN DE GLIFOSATO

Nanocompuestos Fluorescentes Basados en Puntos Cuánticos de Sulfuro de Cadmio y Matrices Poliméricas para su Aplicación como Sensor Visual en la Detección de Glifosato

Paula A. Méndez[a]*, Karla Ramírez[b], Alex Lucero[c], Johny R. Rodríguez[d], Betty L. López[e]

[a,d]Grupo de Investigación en Etnofarmacología, Productos Naturales y Alimentos. Escuela de Ciencias Básicas Tecnología e Ingeniería. Universidad Nacional Abierta y a Distancia. Colombia

[b, c]Ingeniería en Nanotecnología. Universidad Politécnica de Tapachula. México

[e]Grupo de Investigación Ciencia de los Materiales. Instituto de Química. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Antioquia. Colombia

**Autor de correspondencia: mendez515@gmail.com*

Palabras Claves: fluorescencia; nanosensor; pesticidas; puntos cuánticos; quitosano.

La seguridad alimentaria ha centrado su preocupación en el uso excesivo de pesticidas, dado que se han encontrado trazas de estos en algunos alimentos. El desarrollo de herramientas de detección rápida y sensibles para estas moléculas es un tema de investigación en evolución; y está en coherencia con el objetivo de desarrollo sostenible No. 2. La presente investigación presenta los resultados de un sensor visual para la detección de glifosato (Gly), basado en nanocompuestos fluorescentes de puntos cuánticos de sulfuro de cadmio (CdS QDs) y matrices poliméricas de quitosano (Q), carboximetilcelulosa (CMC) y pectina (Pec). La metodología se desarrolló en tres etapas: en la primera se sintetizó los nanocompuestos en solución, para ello se utilizó los precursores de la tabla 1 y la matriz polimérica al 1%. Se caracterizaron por UV-vis, FTIR, fluorescencia y TEM.

Tabla 1. Formulaciones preparadas con diferentes concentraciones de $CdCl_2.2.5H_2O$ y $Na_2S.XH_2O$.

Formulación	$CdCl_2.2.5H_2O$	$Na_2S.XH_2O$
F1	5mM	2.5Mm
F2	5mM	5mM
F3	10mM	5mM

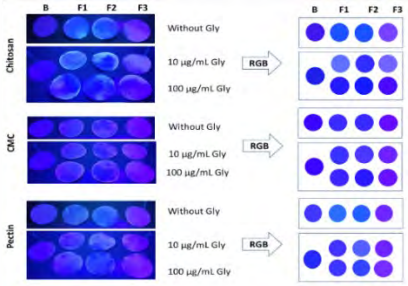


Figura 1. Izquierda: Papel fluorescente tratado con Gly; imágenes tomadas bajo una lámpara UV de 365 nm. Derecha: Código RGB obtenido con Adobe Photoshop Elements 2023.

La segunda etapa consistió en la impregnación de los nanocompuestos en el papel. Una vez obtenido el papel fluorescente, se llevó a cabo la tercera etapa; la detección del Gly en solución y con el papel fluorescente. En solución lograron detectar glifosato en el rango de 1-100 µg/mL; y el papel fluorescente mostró una respuesta de color en 10 y 100 µg/mL de Gly, según el análisis de intensidad de rojo, verde y azul (valores de color RGB), Figura 1. Los nanocompuestos fluorescentes presentaron emisión a 460 nm y propiedades para detectar Gly en el rango de 1-100 µg/mL. Ambos nanocompuestos de quitosano y pectina, en solución y en papel, exhibieron un comportamiento de sensor "turn-on", mientras que la carboximetilcelulosa como sensor "turn-off".

V-118-O ***IDENTIFICACIÓN Y CLASIFICACIÓN DE ROCAS DE JADE MEDIANTE EL USO DE IMÁGENES HIPERESPECTRALES Y RGB***

Identificación y Clasificación de Rocas de Jade Mediante el Uso de Imágenes Hiperespectrales y RGB

Valentina Espinel Cipagauta[1], Jhonny Osorio Gallego[1], Patricia Quintana Owen[2] Juan Jose Alvarado Gil[2], Jorge Andres Ramírez-Rincón[1*]

[1]Grupo de Fisicoquímica y Análisis Matemático, Facultad de Ciencias y Humanidades, Fundación Universidad de América, Avda. Circunvalar No. 20-53, Bogotá DC, Colombia
[2]Applied Physics Department, CINVESTAV-IPN, Mérida, Yucatán C.P. 97310, México
**Autor de correspondencia: Jorge.ramirez@profesores.umarica.edu.co*

Palabras clave: Rocas de jade; Jadeita; Nefrita; Espectrocopía de imágenes; Caracterización Química.

A lo largo de la historia, los jades han desempeñado un papel importante en la cultura, mitología y comercio de diversas grupos alrededor del mundo. Estos son un tipo de piedra con características únicas que atraen la atención de historiadores y geólogos debido a su tono, brillo y textura inusual, lo que hace que cada pieza sea un objeto único. Los jades se clasifican como una piedra metamórfica extremadamente resistente, compuesta principalmente de nefrita, que es un mineral de silicato de calcio y magnesio de grano fino [Ca_2,(Mg,Fe)$_5$,$Si_8O_{22}(OH)_2Ca2$,(Mg,Fe)5,Si8O22(OH)2], y la jadeíta, compuesta por silicato de aluminio y sodio que cristaliza en el sistema monoclínico [Na $AlSi_2O_6Si2O6$], perteneciente al grupo de piroxeno. Estos son regularmente translúcidos, de color blanco verdoso y con textura fibrosa, con algunos contenidos de cromo o hierro. La proporción y distribución de cada compuesto en una roca específica brinda información sobre su composición, resistencia, valor geológico y comercial, lo que hace que el conocimiento detallado de estas propiedades sea crucial para la clasificación precisa de estos objetos.

La espectroscopía de imágenes es una técnica utilizada principalmente en la industria alimentaria, ya que permite determinar la distribución espacial de las propiedades ópticas de un conjunto de muestras de interés a partir de su huella espectral. Esta metodología es de especial interés, ya que representa una alternativa confiable a los análisis químicos tradicionales, que en muchos casos son costosos, requieren mucho tiempo de análisis y no permiten obtener resultados en tiempo real. Este trabajo propone una metodología de análisis espectral basada en el uso de imágenes hiperespectrales en el rango VIS-NIR (400-1000 nm) y multiespectrales RGB, para la identificación y clasificación química de piedras de jade extraídas de las ruinas de la cultura maya en la península de Yucatán, México.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Materiales Transportadores de Huecos Para Celdas Solares de Perovskita

Luis A Illicachi[a*], Alejandro Ortiz[b], Braulio A Insuasty[b]

[a] *Grupo de Investigación en Química y Biotecnología, Universidad Santiago de Cali, Colombia*
[b] *Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos, Universidad del Valle, Colombia*
Auto correspondencia: luis.illicachi00@usc.edu.co

Palabras claves: Celdas Solares de Perovskita; Transportadores de Huecos; Fenotiazina; Selenofeno; Triazatruxeno

La investigación en química de materiales moleculares orgánicos se ha encaminado hacia la obtención de nuevos sistemas fotoactivos. El objetivo de dichas investigaciones es diseñar nuevas estrategias que permitan obtener energía, de forma más limpia que la proveniente de combustibles fósiles. Las celdas solares de perovskita se convierten en una tecnología muy prometedora en el ámbito de sistemas fotovoltaicos que permitan la obtención de energía eléctrica a partir energía solar. Uno de los principales componentes y que es de gran interés para los científicos, son los materiales transportadores de huecos (HTM por sus siglas en ingles), tal es su importancia, que en la actualidad gran parte de la investigación en fotovoltaica está encaminada en la obtención de nuevos HTMs que permitan mejorar los rendimientos fotovoltaicos. En ese sentido, presentamos la síntesis y evaluación de la eficiencia en sistemas fotovoltaicos de perovskita de tres series de compuestos (Figura 1), la primera basada en el núcleo del triazatruxeno con 3 HTMs **DTTX-1**, **DTTX-2** y **DTTX-3**. Los cuales exhibieron eficiencias de 17.42, 18.30 y 12.68%, respectivamente. En segunda instancia compuestos basados en el núcleo de selenofeno **TPASe-1** y **TPASe-3** cuyas eficiencias fueron de 13.72 y 12.44 %, respectivamente. Finalmente, compuestos tipo *spiro* basados en los núcleos de fenotiazina y fenoxazina, nombrados como **spiro-POZ** y **spiro-PTZ** con eficiencias de 18.14 y 18.36%, respectivamente. Demostrando la gran aplicabilidad de diversos núcleos orgánicos en el campo de las celdas solares.

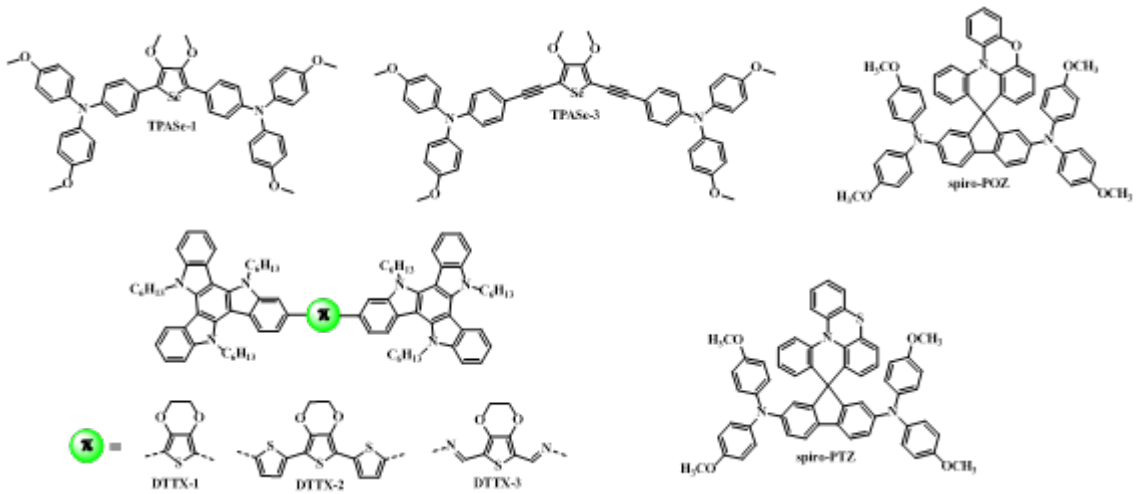


Figura 1. Materiales trasportadores de huecos para celdas solares de perovskita.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-122-O MATERIALES TRANSPORTADORES DE HUECOS BASADOS EN BODIPY PARA CELDAS SOLARES DE PEROVSKITA DE CONFIGURACIÓN INVERTIDA EFICIENTES

Materiales Transportadores de Huecos Basados En BODIPY para Celdas Solares de Perovskita de Configuración Invertida Eficientes

Isabel Seoneray [a], * Alejandro Ortiz [a], Angélica García[b]

[a] *Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos, Universidad del Valle, Colombia*
[b] *Grupo de Investigación en Ciencias Básicas y Clínicas de la Salud, Pontificia Universidad Javeriana-Cali, Colombia*
** Autor de correspondencia: isabel.seoneray@correounivalle.edu.co*

Palabras clave: BODIPY; arilaminas; materiales transportadores de huecos (HTMs); celdas solares de perovskita (PSCs).

Las celdas solares de perovskita (PSCs) han experimentado un incremento significativo en la eficiencia de conversión energética (PCE), superando el 25 % gracias a avances en ingeniería de celdas y el desarrollo de capas interfaciales. Sin embargo, la estabilidad de los dispositivos continúa siendo un gran desafío. Con el fin de superar dicho obstáculo, el diseño y síntesis de nuevos transportadores de huecos (HTMs) libres de dopantes es de gran importancia puesto que, son necesarios para separar la capa de la perovskita que es sensible a la humedad, además, de otros factores externos y así evitar su degradación. Es así que en este trabajo se reporta la síntesis de cinco HTMs libres de dopantes basado en una unidad de BODIPY funcionalizada en las posiciones *meso* y *α*– con unidades de pireno y arilaminas, respectivamente. Los sistemas obtenidos presentaron una amplia absorción en la región del visible, gran estabilidad térmica, *bandgap* óptico estrecho y niveles de energía apropiados para su aplicación como capas de transporte de huecos. El desempeño de los compuestos **PyBDP 1–5** como HTMs se evaluó en celdas solares de perovskita de configuración invertida (p-i-n) (**Fig. 1**) y se comparó con el compuesto de referencia politriarilamina (PTAA), el cual es el HTM comúnmente empleado en este tipo de arquitectura de celda. La incorporación de estos compuestos como HTMs resultó en una destacada eficiencia de 20.4% para los dispositivos que incluían el compuesto **PyBDP-1**, superando aquellos que contenían el HTM de referencia PTAA (20.3%). De esta manera se demuestra que los derivados de BODIPY son una prometedora alternativa para la síntesis de HTMs simples y eficientes.

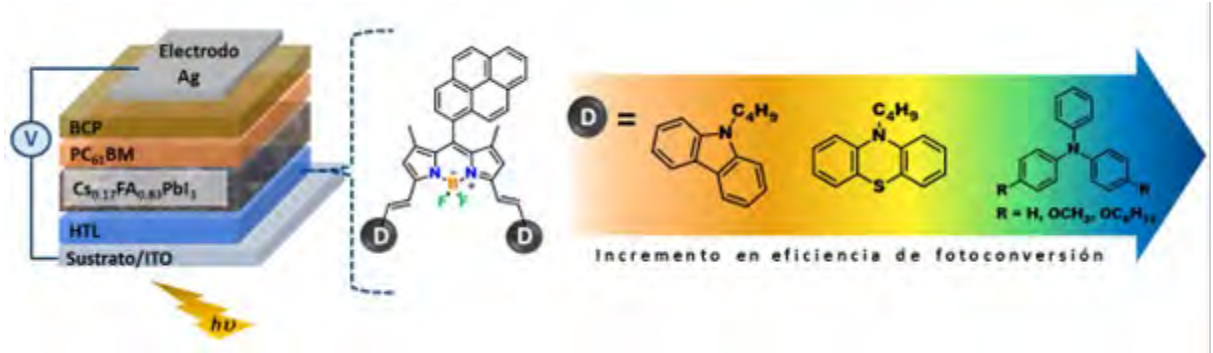


Figura 1. De derecha a izquierda, estructura general de los HTMs **PyBDP 1–5** y representación esquemática de la celda de perovskita empleada.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-123-O ***INVESTIGACIÓN DE LAS PROPIEDADES CONDUCTORAS DE LOS DERIVADOS ELECTRO-POLIMERIZADOS DE TIOFENO Y PIRROL: CORRELACIÓN ENTRE PARÁMETROS EXPERIMENTALES Y TEÓRICOS***

Investigación de las propiedades conductoras de los derivados electro-polimerizados de tiofeno y pirrol: correlación entre parámetros experimentales y teóricos

Gean C Arteaga [a,c*], Rodrigo D. Salgado[b], Carlos Garcia[c], Lyda Espitia[a], Karina S. Pastor[a], Pedro P. Espitia[a], Claudia Galeano[a], Sara Soto, Shirley Salgado[a], Catalina Tovar[d], Dina Ricardo[d], Osnamir Bru[c], Alicia Humanez[c], Paula Aviles[d], Ana Peñata[a], Ana Negrete[d]

[a] Grupo de Investigación Biomédicas y Biología Molecular Universidad del Sinú E.B.Z. Montería, Colombia.
[b] Grupo de Investigación Ciencias, Entorno y Optimización, Corporación Universitaria Del Caribe, Sincelejo, Colombia
[c] Departamento de Ciencias Básicas. Facultad de Ciencias e Ingenierías., Universidad del Sinú., Cra 1w No 38-153 Barrio Juan XXIII, Montería, Colombia.
[d] Grupo de Investigación Enfermedades Tropicales y Resistencia Bacteriana, Universidad del Sinú E.B.Z., Montería, Colombia

** Autor de correspondencia: geanarteaga@unisinu.edu.c o*

Palabras Claves: : 3,4-etilendioxitiofeno, 3,4-propilendioxitiofeno; 3,4-etilendioxipirrol, 3,4-propilendioxipirrol, *band gap* teórico y experimental (E)

En este trabajo se correlacionaron variables teóricas y experimentales determinadas para la electro-polimerización de derivados de tiofeno y pirrol. Los cálculos se realizaron empleando el método de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) en el nivel B3LYP/6-311G (d, p). Los datos fueron coherentes con los obtenidos experimentalmente. Así, los valores de *band gap* teóricos y experimentales son menores para los derivados de tiofeno, en comparación con los derivados de pirrol; este hecho puede explicarse por interacciones atractivas intermoleculares no covalentes S---O que inducirían una mayor estabilización de la planaridad de la cadena polimérica, aumentando así su aromaticidad. El aumento de la aromaticidad del oligómero provocaría una mayor interacción entre las cadenas, creando un eficiente π□stacking□□entre regiones aromáticas. Las estructuras π–stacked favorecerían la deslocalización electrónica y de carga (hopping) entre diferentes cadenas poliméricas, aumentando la conductividad de la matriz polimérica. Se comprobó además que la geometría del backbone de la sustitución alquilendioxi modula el carácter π-donante del oxígeno y esto influye directamente en el aumento de la conductividad. También se obtuvieron valores similares para las bandas obtenidas a partir del FTIR experimental y del IR calculado, lo que permite postular la estructura conformacional de los oligómeros en la matriz polimérica.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Obtención y Caracterización Morfológica de Matrices Nanoestructuradas de Oro

Cristhian A. Visbal[a,b], Wilkendry Ramos Cervantes[b]*, John Betancourt[a,b], Angélica Pérez[b,c], Jesús E. Diosa[b,d], Edgar Mosquera Vargas[b,d], Luis A. Rodríguez[b,d], Lorena Marín[a,b]

[a] *Grupo de Películas Delgadas (GPD), Departamento de Física, Universidad del Valle, Cali A.A. 25360, Colombia*
[b] *Centro de Excelencia en Nuevos Materiales (CENM), Universidad del Valle, Cali A.A. 25360, Colombia*
[c] *Grupo de Óptica Cuántica, Departamento de Física, Universidad del Valle, Cali A.A. 25360, Colombia*
[d] *Grupo de Transiciones de Fase y Materiales Funcionales (GTFMF), Departamento de Física, Universidad del Valle, Cali A.A. 25360, Colombia*

**Wilkendry Ramos: wilkendry.ramos@correounivalle.edu.co*

Palabras Clave: SERS; Distribución; Homogeneidad; Tratamiento térmico

Las nanoestructuras (NEs) de oro (Au) son de interés para en el sensado de diferentes sustancias gracias a sus propiedades plasmónicas. Esta propiedad permite incrementar en varios órdenes de magnitud la señal espectroscópica de diversos analitos que se encuentren en la superficie de las NEs o entre espacios interpartículas, lo que ha dado lugar al desarrollo de sensores que utilizan la técnica como espectroscopia Raman incrementada por superficie (SERS – por sus siglas en inglés) y por esto, optimizar la síntesis de las NEs es crucial para controlar sus propiedades plasmónicas. En este trabajo, NEs de Au fueron fabricadas mediante la fragmentación térmica de películas delgadas, crecidas por el método de evaporación térmica. Se evaluó el efecto de la temperatura (100, 300 y 500 °C) y el tiempo (0.5, 1.0, 3.0, 6.0 y 12.0 h) de tratamiento térmico sobre las características morfológicas de las NEs obtenidas. Las muestras se caracterizaron por microscopía electrónica de barrido y microscopía de fuerza atómica.

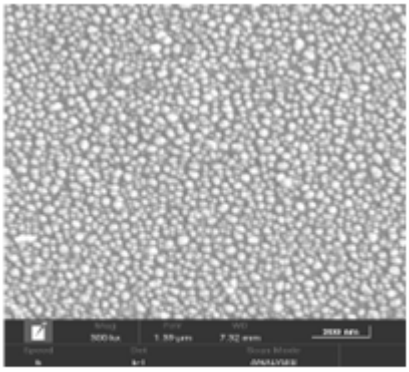


Figura 1. Imagen SEM de tratamiento térmico durante 3 h.

Se observó que a medida que incrementa el tiempo de tratamiento térmico (TT) el número de NEs presentes aumenta. Asimismo, a partir de 3 h de TT la distribución de NEs es más uniforme (ver los granos de la Figura). Además, los diámetros de las NEs varían entre 10 y varias decenas de nanómetros según las condiciones de síntesis. En resumen, se obtiene que bajo TT prolongados la distribución es más uniforme y el tamaño de NE llega a ser suficientemente pequeño para posibles aplicaciones a sustratos SERS.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-345-O ***SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN, ESTUDIOS ESTRUCTURALES Y COMPUTACIONALES DE 3 PEROVSKITAS HÍBRIDAS BIDIMENSIONALES.***

Síntesis, caracterización, estudios estructurales y computacionales de 3 perovskitas híbridas bidimensionales

Mario A. Macías [a], Johan D. Lozano [a] *

[a] *Departamento de Química, Universidad de los Andes, Colombia*
* *jd.lozanoc@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: perovskita; bidimensionalidad; band-gap; estabilidad; bandas.

Los materiales clasificados como perovskitas (ABX_3) han atraído una amplia atención debido a múltiples propiedades en el campo tecnológico como: fotoluminiscencia, magnetismo, ferroelectricidad, propiedades ópticas no lineales, entre otras[1]. Específicamente, los compuestos híbridos, aquellos que en su estructura incorporan cationes orgánicos voluminosos en la posición A, presentan un gran interés debido a la modulación de este tipo de propiedades[2]. Teniendo esto en cuenta, se sintetizaron monocristales mediante autoensamblaje en solución de tres perovksitas bidimensionales $(Anilina)_2CuCl_4$, $(Piperazina)_2PbCl_4$ y $[(2\text{-}Aminopirazina)_2Cl_2]PbCl_4$ aún no reportados en la literatura (Figura 1). Estos tres compuestos fueron caracterizados mediante difracción de rayos-X de monocristal y polvo, TGA, DSC, reflectancia difusa y fluorescencia aplicada en compuestos sólidos. Ahora bien, con el fin de entender las propiedades electrónicas de cada uno de los sistemas se realizaron cálculos computacionales centrados en sólidos periódicos. Estos cálculos fueron llevados a cabo en el software de uso libre Quantum Espresso. De esta forma, fue posible comparar los valores de band gap entre los valores experimentales respecto a los obtenidos mediante los cálculos. Adicionalmente, se obtuvieron los orbitales que predominan en la formación tanto de la banda de valencia como de la banda de conducción.

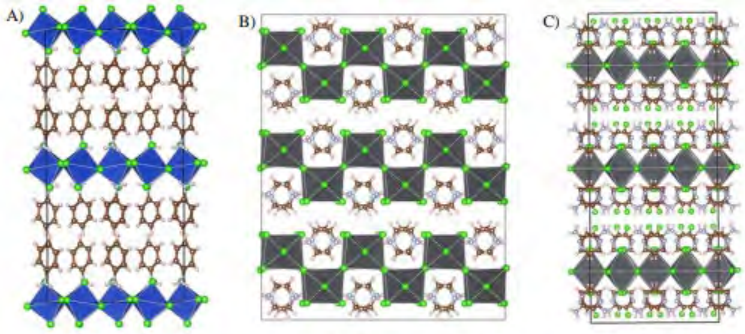


Figura 1. Estructuras cristalinas de A) $(Anilina)_2CuCl_4$, B) $(Piperazina)_2PbCl_4$ y C) $[(2\text{-}Aminopirazina)_2Cl_2]PbCl_4$

Referencias:

[1] Carter, C. B.; Norton, M. G.; Carter, C. B.; Norton, M. G. Introduction. In Ceramic Materials; Springer New York, 2013; pp 3–15
[2] Saparov, B.; Mitzi, D. Organic–Inorganic Perovskites: Structural Versatility For Functional Materials Design. Chemical Reviews 2016, 116 (7), 4558-4596

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-367-O ***MEJORA EN LA ESTABILIDAD Y PROPIEDADES FOTOVOLTAICAS EN CELDAS SOLARES DE PEROVSKITA CON ARQUITECTURA INVERTIDA (IPSCS)***

Mejora en la estabilidad y propiedades fotovoltaicas en celdas solares de perovskita con arquitectura invertida (IPSCs)

Sergio E. Reyes [a,*], Martín E. González[b], Eider A. Erazo[b], Pablo Ortiz[a], María T. Cortés[b]

[a] *Departamento de Ingeniería Química, Universidad de los Andes, Colombia*
[b] *Departamento de Química, Universidad de los Andes, Colombia*
[*] se.reyes@uniandes.edu.co

Palabras Clave: Celdas solares de perovskita con arquitectura invertida (IPSC); Eficiencia de conversión energética (PCE); Material transportador de huecos (MTH); Estabilidad.

Actualmente, las celdas solares de perovskita y en particular aquellas con arquitectura invertida (IPSCs), sobresalen por su eficiencia de conversión de energía (PCE) similar a la de las celdas solares de silicio. Debido a que en su fabricación se emplean rutas químicas a bajas temperaturas, estos dispositivos se presentan como una alternativa costo-efectiva con gran potencial para la generación futura de energía fotovoltaica. Estas celdas emplean materiales fotoactivos con estructura perovskita (ABX_3) que, al recibir luz, genera electrones y huecos que a su vez. viajan por un material transportador de electrones (MTE) y un material transportador de huecos (MTH) respectivamente, hasta llegar al circuito externo, y generar corriente eléctrica útil.

El óxido de níquel (NiOx) ha sido explorado como MTH, siendo compatible en las IPSCs debido al elevado transporte de carga, la alineación energética entre las capas adyacentes y su efecto en la estabilidad de la PCE. A pesar de los buenos resultados reportados en la bibliografía existen oportunidades de mejora tanto en las propiedades volumétricas del NiOx como en la modificación de la interface NiOx/Perovskita, elementos fundamentales en el desempeño del dispositivo.

En este estudio se evalúo el efecto que tiene en las propiedades fotovoltaicas y optoelectrónicas la adición de NH_4F sobre NiOx puro y NiOx dopado con Indio al 0.5% (NiOx:In), ambos depositados electroquimicamente. La modificación interfacial se hizo mediante la técnica de spin-coating utilizando 3 niveles de concentración de NH_4F (0%, 1% y 3% másico).

Entre los resultados se encontró que una adición del 1% NH_4F sobre NiOx incrementa la eficiencia promedio de las celdas en un 3.3%, mientras que con 3% NH_4F sobre NiOx:In esta mejora un 4.1% alcanzando valores de eficiencia cercanos al 20%. En las pruebas de estabilidad a los 50 días, los dispositivos con NH_4F mostraron eficiencias promedio del 14.5%, en contraste con el 12.4% de las celdas sin esta interface. Se observo que al agregar una capa de NH_4F sobre un MTH de NiOx o NiOx:In, incrementa la movilidad de portadores de carga entre el MTH/Perovskita y modifica la morfología de la perovskita, mejorando la eficiencia y estabilidad de las IPSCs.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA INDUSTRIAL, TECNOLOGÍA E INNOVACIÓN

XI-129-O SÍNTESIS DE NANOMATERIALES DE CARBONO FLUORESCENTES (NCFS) A PARTIR DE COQUE DE PETRÓLEO Y SU POTENCIAL USO COMO TRAZADOR DE FLUIDOS DE FRACTURA

Síntesis de Nanomateriales de Carbono Fluorescentes (NCFs) a Partir de Coque de Petróleo y su Potencial Uso como Trazador de Fluidos de Fractura

Ivan D. Gómez [a], Dalje S. Barbosa [b*], José M. Usuriaga [b], Rodrigo G. Torres [b], Marisol Fernandez [b]

[a] *PSL Proanálisis SAS BIC, Cl. 200 #10-77, Floridablanca, Santander-Colombia.*

[b] *Ecopetrol S. A. – Centro de Innovación y Tecnología - ICP, COLOMBIA*

*Autor de correspondencia: dalje.barbosa@ecopetrol.com.co

Palabras Claves: nanomateriales fluorescentes; trazadores; fluidos de fractura; puntos cuánticos.

Los nanomateriales basados en carbono con propiedades fluorescentes, tales como, los puntos cuánticos de carbono (CQDs) son producidos generalmente usando diferentes precursores de carbono; como son, grafito, fibras de carbono, fulerenos, monosacáridos, aminoácidos y ácidos orgánicos. No obstante, en la actualidad se debe apostar por otros precursores con alto contenido de carbono, menos costosos, que sean ricos en compuestos aromáticos y de gran disponibilidad. En este sentido, el coque de petróleo tradicionalmente ha sido considerado como un subproducto indeseable en los procesos de refinación, debido a su bajo costo entre otros. Además, el coque de petróleo se ha utilizado en procesos de combustión para generar energía, pero con un alto nivel de contaminación ambiental. Sin embargo, cabe mencionar que su rica estructura aromática natural y sus compuestos heteroatómicos le confieren una particular característica para ser un virtual precursor de la producción a gran escala de nanomateriales de alta calidad con propiedades ópticas mejoradas de fluorescencia.

En este estudio, se desarrolló una metodología de carbonización asistida por microondas (Figura 1) para obtener nanomateriales de carbono fluorescentes (NCFs). El protocolo experimental consistió, en la funcionalización del óxido de coque en presencia de ácido cítrico y etilendiamina, obteniendo así NCFs altamente fluorescentes que presentan una fotoluminiscencia de emisión máxima a 441 nm.

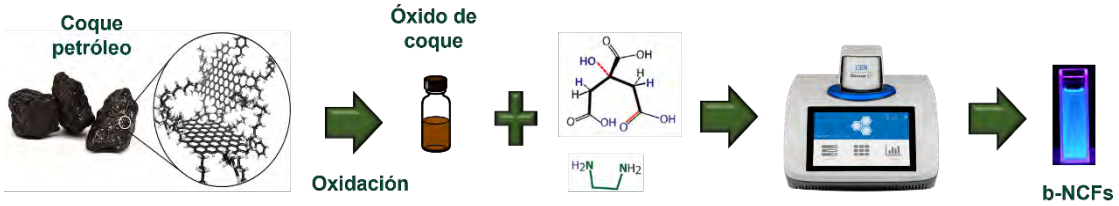


Figura 1. Síntesis de b-NCFs a partir de coque de petróleo

Como posible aplicación, se exploró el dopaje de un fluido de fractura con el nanomaterial sintetizado. Las pruebas de estabilidad y compatibilidad realizadas a nivel de laboratorio sugieren que los b-NCFs podrían ser utilizados como trazador para fluidos de fracturación convencionales. Está previsto a fututo, la realización de un piloto en campo para determinar el alcance de este producto en este tipo de aplicaciones.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XI-130-O ***DESARROLLO DE UN INGREDIENTE CON CANNABINOIDES PARA LA INDUSTRIA DE BEBIDAS TIPO "SOFT DRINK"***

Desarrollo de un Ingrediente con Cannabinoides para la Industria de Bebidas Tipo "Soft Drink"

Julián G. Amaya*[a], Ivan D. Gil[b], Luis F. Gutierrez[c]

a Centro de Excelencia en Cannabis y Agronegocios, Universidad Nacional de Colombia, Colombia
b Centro de Excelencia en Cannabis y Agronegocios, Universidad Nacional de Colombia, Colombia
c Instituto de Ciencia y Tecnología de Alimentos, Centro de Excelencia en Cannabis y Agronegocios, Universidad Nacional de Colombia, Colombia
* Autor de correspondencia: juamayap@unal.edu.co

Palabras claves: CBD; Emulsión; Bebidas; Extracción; Cannabis

El CBD es uno de los compuestos más abundantes dentro de la planta de Cannabis. Considerando sus notables beneficios medicinales, se ha generado gran interés para su aplicación en diversas industrias incluyendo la de alimentos, lo que ha fomentado los procesos de regulación y legalización del mercado de cannabis en varios países del mundo. En este trabajo se investigaron las mejores condiciones de extracción con etanol a diferentes temperaturas, tiempos y proporciones de disolvente y material vegetal, así como la configuración de emulsión más adecuada bajo el máximo porcentaje de recuperación de CBD en el extracto. Para realizar el proceso de extracción, se descarboxiló a 140ºC por 30 min para tener la mayor conversión de CBDA en CBD, luego la flor descarboxilada se colocó en el equipo de extracción seguido del etanol, se ajustó la velocidad de agitación a 400 rpm. Las condiciones de temperatura, relación solvente a material vegetal y los tiempos de extracción se ven en la tabla 1. La configuración en donde se logró el mayor porcentaje de recuperación se da a temperatura ambiente y una relación de etanol flor vegetal de 12:1. Para llevar a cabo el proceso de emulsión, se realizó un diseño de superficie de respuesta Box-behnken evaluando los factores: concentración del extracto, tiempo de sonicación y concentración del emulsificante NanoStabilizer-LSO que se reemplazó por lecitina y Tween 80 a medida que iba disminuyendo su adición en la mezcla (Tabla 2). La preparación de la emulsión se llevó a cabo en tres pasos: primero se mezcló el extracto con el NanoStabilizer-LSO y agua, después se agitó en una plancha de calentamiento por 10 min, luego se llevó a ultrasonido y finalmente se filtró. El filtrado se analizó en Zetasizer determinando el tamaño de partícula, índice de polidispersidad y potencial Z. Las condiciones más favorables se dieron sin la adición del NanoStabilizer-LSO.

Tabla 1. Condiciones de extracción con etanol

Temperatura (°C)	Tiempo (min)					
	2	6	13	18	30	40
(-18;-19.6)	Ethanol [12/1]	Ethanol [12/1]	Ethanol [12/1]	Ethanol [12/1]	Ethanol [12/1]	Ethanol [12/1]
	Ethanol [8/1]	Ethanol [8/1]	Ethanol [8/1]	Ethanol [8/1]	Ethanol [8/1]	Ethanol [8/1]
	Ethanol [10/1]	Ethanol [10/1]	Ethanol [10/1]	Ethanol [10/1]	Ethanol [10/1]	Ethanol [10/1]
Ambiente (28 °C)	Ethanol [12/1]	Ethanol [12/1]	Ethanol [12/1]	Ethanol [12/1]	Ethanol [12/1]	Ethanol [12/1]
	Ethanol [8/1]	Ethanol [8/1]	Ethanol [8/1]	Ethanol [8/1]	Ethanol [8/1]	Ethanol [8/1]
	Ethanol [10/1]	Ethanol [10/1]	Ethanol [10/1]	Ethanol [10/1]	Ethanol [10/1]	Ethanol [10/1]

Tabla 2. Factores de preparación de la emulsión

Tiempo de sonicación (min)	Extracto %	NanostabilizerLSO %
7.5	1	0
10	2	2
12.5	3	4

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XI-230-O SÍNTESIS DE NUEVO FARMACÓFORO ARA-II, A PARTIR DEL REDISEÑO IN-SILICO BASADO EN LA AFINIDAD DE LOS DIFERENTES BLANCOS TERAPÉUTICOS Y EVALUACIÓN POR CRIBADO VIRTUAL

Síntesis de Nuevo Farmacóforo ARA-II, a partir del Rediseño *in-silico* Basado en la Afinidad de los Diferentes Blancos Terapéuticos y Evaluación por Cribado Virtual

James O. Guevara*, Maria A. Ospina [a], Paola M. Sánchez [a]

[a] *INQA, Universidad El Bosque, Colombia*
** Autor de correspondencia: joguevara@unbosque.edu.co*

Palabras Claves: Antagonista de Receptor Angiotensina II (ARA-II); Rediseño Estructural; *in silico;* Síntesis.

La hipertensión es una de las enfermedades más comunes a nivel mundial y según las estadísticas presentadas en el año 2021 en Colombia, existían 413.091 casos activos de esta patología, de los que 61% son mujeres. Por esta razón, la hipertensión se trata de un tema central en la salud pública. Ahora bien, el tratamiento farmacológico de primera línea es el losartán, un ARA-II, actualmente enfocado en la selectividad al receptor AT1, por su farmacóforo basado en un bifenilo y un sistema heterociclo (*figura 1)*. Actualmente las investigaciones mediante cribado virtual en estas moléculas se sitúan en las modificaciones estructurales que acompañan al farmacóforo; sin embargo, la presente investigación, tiene como finalidad hacer evaluaciones *in silico* de un nuevo farmacóforo ARA-II a partir del rediseño estructural actual, determinando el blanco molecular adecuado entre los distintos subtipos de receptores por medio de cribado virtual y redes neuronales, siendo herramientas necesarias a la hora de proponer candidatos para su posterior síntesis.

De acuerdo a lo anterior, se generó una base de datos en la que se tomó a la AngiotensinaII (AngII), moléculas comerciales y aquellas que se encontraban en investigación, para evaluar la energía de afinidad de estas hacia los blancos moleculares, sus valores IC50 y sus descriptores moleculares. Una vez culminado este proceso, se tuvieron en cuenta aquellas moléculas con mayores energías de afinidad comparadas con la AngII; tomando así sus descriptores moleculares y llevándolos a la red neuronal, en la que se tuvieron en cuenta diferentes combinaciones de los mismos, para evaluar la precisión y exactitud de la predicción de los valores IC50 (*figura 2)*. Con este último procedimiento, se generaron los diferentes rediseños del farmacóforo en las que se llevaron a cabo las mismas metodologías ya mencionadas, además de estimar sus valores de LogP y su predicción de toxicidad, seleccionando el candidato para su posterior síntesis que constó de dos adiciones nucleofílicas para su obtención y caracterización por técnicas espectroscópicas.

En conclusión, esta investigación denota como el descubrimiento *in silico* de nuevos fármacos ARA-II, mejora la afinidad e IC50 de posibles candidatos reduciendo los costos del proceso habitual.

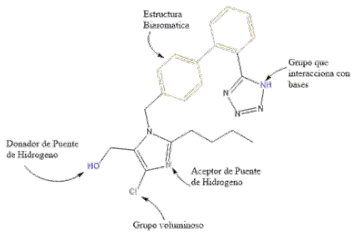


Figura 1. Estructura del Losartán donde se evidencian características de su farmacóforo.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

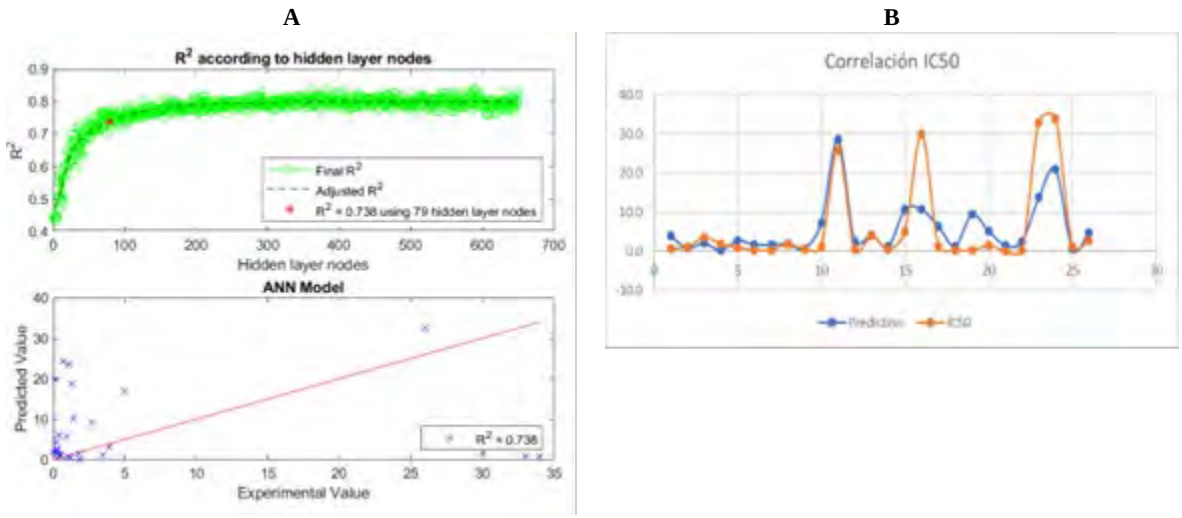


Figura 2. Exactitud de las predicciones generadas por la Red Neuronal INQA con valores de R^2 de 0.738 en las que denota el R^2 ajustado (A) y la correlación de los valores de IC50 predichos con los reales de los fármacos comerciales.

Referencias

Abraham, H. M. A., White, C. M., & White, W. B. (2014). The Comparative Efficacy and Safety of the Angiotensin Receptor Blockers in the Management of Hypertension and Other Cardiovascular Diseases. *Drug Safety*, *38*(1). 10.1007/s40264-014-0239-7

Alexander, M. R., & Yang, E. H. (2019, 02 22). *Hypertension: Practice Essentials, Background, Pathophysiology*. Medscape Reference. https://emedicine.medscape.com/article/241381-overview

European Society of Cardiology. (2018). 2018 ESC/ESH Guidelines for the management of arterial hypertension. *European Heart Journal*, *39*, 3021–3104. 10.1093/eurheartj/ehy339

Fondo Colombiano de Enfermedades de Alto Costo. (2022). *Hipertensión Arterial (HTA)*. Cuenta de Alto Costo-Día Mundial de la Hipertensión Arterial 2022. https://cuentadealtocosto.org/site/general/dia-mundial-de-la-hipertension-arterial-2022/

Roy, K. (Ed.). (2017). *Advances in QSAR Modeling: Applications in Pharmaceutical, Chemical, Food, Agricultural and Environmental Sciences*. Springer International Publishing. 10.1007/978-3-319-56850-8

World Health Organization. (2022). *World health statistics 2022: monitoring health for the SDGs, sustainable development goals*. World Health Organization. 978-92-4-005114-0

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA INORGÁNICA

II-132-O SÍNTESIS DE NANOPARTÍCULAS DE COBRE Y PLATA MEDIANTE REDUCCIÓN QUÍMICA Y EVALUACIÓN DE SU ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA CONTRA RALSTONIA SOLANACEARUM

Síntesis de Nanopartículas de Cobre y Plata Mediante Reducción Química y Evaluación de su Actividad Antibacteriana contra *Ralstonia solanacearum*

Angélica T. García S. [a]*, Eliseo Avella A. [b], Adriana González A. [c], Álvaro Duarte R. [d]

[a b d] Grupo de investigación: Nuevos Materiales Nano y Supramoleculares, Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia - Sede Bogotá, Colombia.
[c] Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad Nacional de Colombia – Sede Bogotá, Colombia.
*atgarcias@unal.edu.co

Palabras clave: Nanopartículas; control antibacteriano; bacteria fitopatógena; Moko del plátano.

RESUMEN

Ralstonia solanacearum es una bacteria fitopatógena que afecta a un amplio rango de hospedantes de importancia agronómica entre los que se encuentra el plátano (*Musa x paradisiaca*), causando la enfermedad denominada Moko que afecta un amplio rango de musáceas a nivel mundial, siendo este un producto hortícola de importancia en la alimentación humana y en la economía colombiana. Para el control de esta enfermedad se han utilizado diferentes pesticidas y antibióticos, pero la aplicación inapropiada e irracional de estos productos no muestran resultados satisfactorios. En este estudio se sintetizaron dos tamaños diferentes de nanopartículas de plata [1-AgNPs] y [2-AgNPs] mediante reducción química empleando nitrato de plata, borohidruro de sodio y citrato de sodio, y para la síntesis de nanopartículas de cobre [1-CuNPs] y [2-CuNPs], cloruro de cobre y ácido L-ascórbico. Para la caracterización se emplearon técnicas como Dispersión Dinámica de Luz (DLS), Espectroscopia Ultravioleta visible (Uv-Vis), Espectroscopia Infrarroja (IR), Espectroscopia Raman, Difracción de Rayos X (DRX), Absorción Atómica de Llama (FAAS), Microscopia Electrónica de Barrido (SEM) y Microscopia Electrónica de Transmisión (TEM), con el fin de identificar la composición, distribución de tamaño y morfología. Posteriormente, a partir de un pseudotallo de plátano proveniente de un cultivo de Norte de Santander-Colombia, que presentaba síntomas de necrosis de haces vasculares y exudado bacteriano, se aisló e identificó *R. solanacearum* y se evaluó *in vitro* la actividad antibacteriana de las nanopartículas contra este fitopatógeno por el método de difusión en pozo y se determinó la concentración mínima inhibitoria (CMI) mediante microdilución en caldo. Como resultado se evidenció una mayor actividad antibacteriana para las nanopartículas de cobre demostrando su potencial para abordar los desafíos en el tratamiento de esta enfermedad.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

II-133-O ESPECTROSCOPIA INFRARROJA PARA LA DETERMINACIÓN DE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LAS ESTRATIFICACIONES DE UROLITOS EN CANINOS

Espectroscopia Infrarroja para la Determinación de la Composición Química de las Estratificaciones de Urolitos en Caninos

Valeria Ruiz Ramírez [a], **Marcela Manrique-Moreno**[a]*

[a] *Grupo de Bioquímica Estructural de Macromoléculas, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquía, Colombia*

* *Autor de correspondencia: marcela.manrique@udea.edu.co*

Palabras Claves: Urolitiasis; urolitos; multiestratificación de urolitos; espectroscopia infrarroja.

La urolitiasis es una patología que tiene lugar en numerosas razas de perros y se origina por múltiples factores [1]. La cristalización de diversos minerales en las diferentes partes del tracto urinario ocasiona la formación de cálculos, conocidos como urolitos. Estos se caracterizan por ser multiestratificados, es decir que presenta diferentes capas en su morfología, empezando por el núcleo que es donde se inicia la deposición de los minerales, seguido del cuerpo que da la forma al cálculo y finalizando con una corteza [2]. Estas capas pueden presentar diferentes composiciones, es así como la identificación precisa de la composición química de los urolitos es esencial para controlar los factores que contribuyen a la formación de los cálculos, facilitando la elección de medidas terapéuticas a largo plazo por parte de los veterinarios. El objetivo de este trabajo fue determinar la composición química de las diferentes capas presentes en una muestra real de urolitos de canino. Para lograr este objetivo, el urolito fue analizado en sus diferentes estratificaciones a través de una cuidadosa fragmentación y utilizando un módulo de ATR de un equipo Tensor II de Bruker acoplado a un detector MCT. Unos miligramos de cada estratificación fueron depositados en el cristal de diamante y registrado su espectro. Los espectros obtenidos se sometieron a la base de datos previamente desarrollada en el grupo de investigación teniendo en cuenta los minerales más frecuentes en urolitos. Se realizó una validación externa del método, enviado los cálculos renales al *Minnesota Urolith Center*, los resultados reportados por el centro coincidieron con los obtenidos en el laboratorio, evidenciaron así el potencial de la técnica de FT-IR para identificar la composición química de las diferentes fracciones que conforman los urolitos. Actualmente en Colombia, las muestras deben ser enviadas a Estados Unidos para su análisis. Con el desarrollo de la base de datos sería posible prestar este análisis en el país.

Referencias

[1] Hesse, A. (Albrecht), & Neiger, R. (2009). *A colour handbook of urinary stones in small animal medicine*.

[2] Stevenson, A., & Rutgers, C. (2015). *Manejo nutricional de la urolitiasis canina*.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

II-134-O ESTUDIO ESTRUCTURAL Y TEÓRICO DE NUEVOS METALO-FÁRMACOS PARA SU USO COMO POSIBLE AGENTE ANTI-DIABÉTICO

Estudio Estructural y Teórico de Nuevos Metalo-Fármacos para su Uso como Posible Agente Anti-Diabético

Richard F. D'Vries [a], * Andrea Pastrana-Dávila [a], Gianella Minotta [a], Javier Ellena[b], Jose Oñate-Garzón[a], Yamil Liscano[a].

[a] *Universidad Santiago de Cali, Colombia*
[b] *Instituto de Física de Sao Carlos, Universidad de Sao Paulo, Brasil.*
** Autor de correspondencia: richard.dvries@unicauca.edu.co*

Palabras Claves: Metformina; Metalo-farmacos; Anti-diabetico; Dinamica molecular.

El síndrome metabólico (obesidad visceral, dislipidemia, hiperglicemia e hipertensión) es uno de los problemas de salud público que más afectan a las personas a nivel mundial. De hecho, en nuestro país este problema afecta a alrededor del 56.4 % de la población colombiana (Minsalud) en diferentes niveles de complejidad. Como consecuencia de esto, esta población se ve directamente afectada con graves patologías como la diabetes tipo 2, la cual es una enfermedad de alto riesgo. En este sentido, este trabajo tiene como objetivo el desarrollo de nuevos metalo-farmacos que tengan la capacidad de actuar como agentes preventivos en el desarrollo de síndrome metabólico y para el tratamiento de la diabetes. Para esto hemos planteado la síntesis de una serie de complejos de coordinación a partir de metales de transición y la biguanida (metformina), con el fin de obtener nuevos compuestos que presenten propiedades biológicas. Como resultado de esta investigación fueron obtenidos seis complejos de coordinación con metales como Co(II), Ni(II), Cu(II) y Zn(II). Los complejos obtenidos fueron caracterizados por diversas técnicas espectroscópicas y térmicas. En todos los casos fueron obtenidos materiales cristalinos, los cuales fueron caracterizados mediante difracción de rayos X de monocristal. A partir de los datos estructurales obtenidos, fue posible la realización del análisis molecular y supramolecular, además de la realización de un completo estudio bioinformática y teórico acerca de las propiedades fisicoquímicas, farmacocinéticas, predicción de procesos inhibitorios y de posible riesgo en comparación con medicamentos de uso común. Finalmente, se realizó un estudio de docking y dinámica molecular utilizando la proteína quinasa AMP-activada (PDB:6C9F), la cual se encuentra directamente relacionada con el mecanismo de glucogénesis celular.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

II-372-O CARBENOS N-HETEROCÍCLICOS: DE LA REACTIVIDAD A ESTABILIZANTES DE NANOPARTÍCULAS PARA APLICACIONES CATALÍTICAS EN AGUA

Carbenos N-Heterocíclicos: De la Reactividad a Estabilizantes de Nanopartículas para Aplicaciones Catalíticas en Agua

Edwin A. Baquero*

[a] *Estado Sólido y Catálisis Ambiental (ESCA), Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia – Sede Bogotá, Colombia*

**Autor de Correspondencia: eabaquerov@unal.edu.co*

Palabras Clave: Carbenos N-Heterocíclico, Nanopartículas, Intercambio H/D, Hidrogenaciones

Los ligandos Carbeno N-Heterocíclico (NHC) han demostrado ser de gran interés para la comunidad científica debido a su alta capacidad dadora σ, lo que genera enlaces M-NHC más fuertes, estabilizando así especies organometálicas. En consecuencia, los complejos metálicos con esta clase de ligandos han demostrado ser buenos catalizadores para diversas transformaciones químicas en fases orgánica y acuosa. De hecho, gracias a estas propiedades únicas, una de las aplicaciones más recientes de los NHCs es en la estabilización de nanopartículas. Sin embargo, su alta basicidad y nucleofilia hacen que estas moléculas sean inestables en presencia de aire. Esto hace necesario buscar estrategias químicas para superar esta limitación.

Por otro lado, la activación de enlaces C(sp^3)-H es de gran interés para la comunidad científica, ya que es una herramienta poderosa para funcionalizar moléculas orgánicas. La formación de enlaces C-D utilizando esta estrategia permite acceder a moléculas marcadas con deuterio, las cuales se utilizan ampliamente en la industria farmacéutica y en estudios mecanísticos en química orgánica y organometálica. Aunque el intercambio H/D se ha desarrollado principalmente en condiciones homogéneas y heterogéneas, el uso de nanopartículas metálicas como catalizadores para esta reacción sigue siendo un desafío en la química.

En este trabajo, se presentarán los principales avances que hemos logrado en la reactividad de los NHCs libres hacia la síntesis de moléculas más estables que sirven como precursores para complejos organometálicos, así como la síntesis de nanopartículas organometálicas y su aplicación catalítica en procesos de activación de enlaces C-H para el intercambio H/D.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

II-440-O SÍNTESIS DE COMPLEJOS DE COBALTO(III) Y CROMO(III) COMO CATALIZADORES SINGLE-COMPONENT PARA LA ACTIVACIÓN DE CO2 Y EPÓXIDOS

Síntesis de Complejos de Cobalto(III) y Cromo(III) como Catalizadores *Single-Component* para la Activación de CO_2 y Epóxidos

Daniela Fonseca [a]*, David E. Ezenarro [a], René S. Rojas [b], John J. Hurtado [a]

[a] *Laboratorio en Química Inorgánica, Catálisis y Bioinorgánica. Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia.*

[b] *Laboratório de Química Inorgánica, Facultad de Química y Farmácia, Pontifícia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile.*

** d.fonseca100@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: Dióxido de carbono; epóxido; single-component; organocatálisis.

El dióxido de carbono (CO_2) se considera como materia prima renovable, es un gas de efecto invernadero y producto de desecho de la combustión de procesos industriales; lo cual lo hace económico y ampliamente disponible.[1,2,3] El uso del CO_2 como un bloque de construcción sintético ha estado limitado por su estabilidad química y poca reactividad. Sin embargo, se han logrado avances para la activación/uso del CO_2. Por ejemplo, la activación en las reacciones mediadas por metales de transición,[2] o al hacer reaccionar el CO_2 con compuestos como aminas y epóxidos.[3] Diferentes sistemas catalíticos han sido ampliamente utilizados tanto como organocatalizadores y catalizadores homogéneos para la copolimerización de epóxidos y CO_2. Organocatalizadores como líquidos iónicos derivados de aminoácidos, sales de amonio, sales de fosfonio, sales de imidazolio y ligandos basados en bases de Schiff que funcionan en ausencia de halogenuros y metales. Adicionalmente, catalizadores con centros metálicos como: Al(III), Co(III), Cr(III), Fe(III), Zn(II).[3] Estos últimos catalizadores pueden ser del tipo single-component, los cuales son de mayor interés, ya que en la misma estructura está presente un ácido de Lewis (Metal) y la base de Lewis (co-ligando X) importantes en la activación y apertura del epóxido, respectivamente, sin uso de co-catalizador.[3]

En este trabajo se muestran los resultados de la actividad catalítica de tres ligandos (**L1, L2 y L3**) derivados tipo salen y sus respectivos complejos de Co(III) (**1-3)** y de Cr(III) (**4-6**) y se ensayaron para la cicloadición de CO_2 con epóxidos para obtener carbonatos cíclicos (Figura 1). Se ensayaron nueve epóxidos terminales y dos epóxidos internos que fueron el óxido de ciclohexeno y el óxido de limoneno. De acuerdo con los resultados obtenidos **L2** es quien mostró las mejores conversiones sin usar co-catalizador ni disolvente a 100 °C, 8 bar y 9 h, con una conversión máxima de ~99%. En cuanto a los catalizadores, el complejo **5** se destacó por su capacidad de abrir epóxidos internos como el óxido de limoneno con una conversión del 36% a carbonato de limoneno; a partir del óxido de ciclohexeno, se obtuvieron carbonatos cíclicos de *trans*-ciclohexeno y carbonato de poli(ciclohexeno) con una selectividad del 7% y 78%, respectivamente.

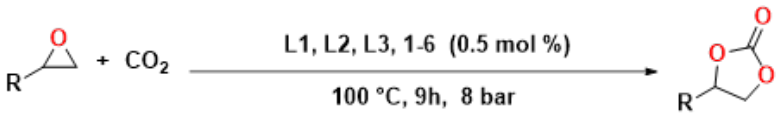


Figura 1. Ensayos catalíticos de **L1**, **L2**, **L3**, **1-6** utilizando 8 bar de CO_2 a 100 °C libre de disolventes durante 9 h y 0,5 mol % de carga de catalizador.

Referencias:

1. Li, Y.; Fang, X.; Junge, K.; Beller, M. *Angew. Chemie - Int. Ed.* **2013**, *52* (36), 9568–9571.
2. Kozak, C. M.; Ambrose, K.; Anderson, T. S. *Coord. Chem. Rev.* **2018**, *376*, 565–587.
3. Mesias-Salazar, A., Trofymchuk, O. S, F., Nachtigall, F. M., Santos, L., Rojas, R. S. Journal of Catalysis 2020, *382*, 150–154.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Un Viaje a Través de las Propiedades Anticancerosas de los Complejos Ciclometalados

Ronan Le Lagadec

Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México
ronan@unam.mx

Palabras Claves: Actividad Anticancerosa; Ciclometalación; Mecanismos de Acción; Metales del Grupo 8

Desde hace varios años, nuestro equipo de investigación estudia las propiedades biológicas de los derivados organometálicos de los metales del grupo 8, en particular como agentes anticancerosos. Para determinar la influencia de distintos determinantes fisicoquímicos y del metal en la actividad citotóxica y en los mecanismos de acción, series de complejos ciclometalados estructuralmente análogos de hierro, rutenio y osmio han sido sintetizados (Figura 1).

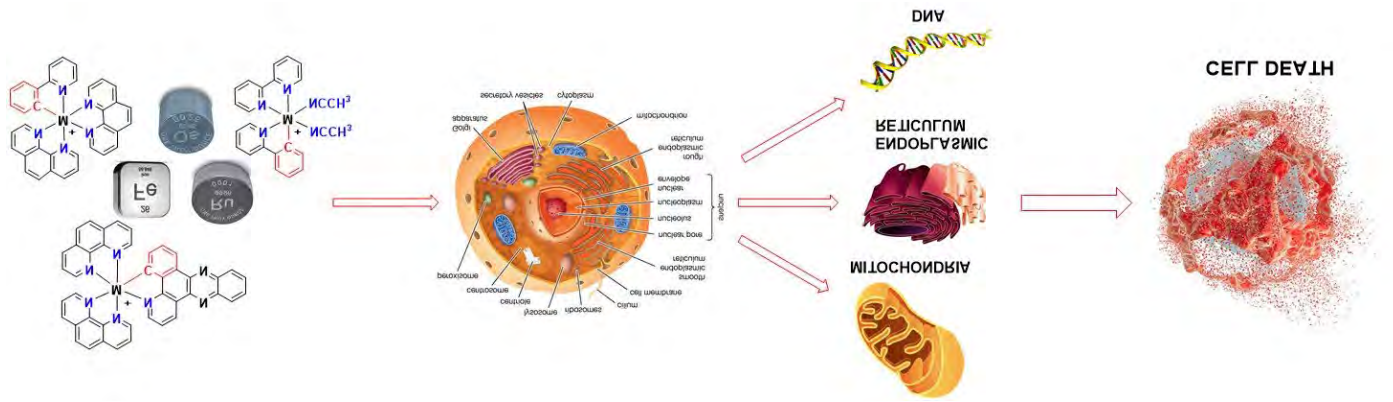


Figura 1. Ejemplos de metalociclos catiónicos estudiados y posibles rutas de acción

La mayoría de los compuestos mostró una actividad citotóxica elevada en distintas líneas celulares cancerosas y posibles dianas biológicas fueron identificadas. Al comparar la actividad de los complejos de los distintos metales, se obtuvieron resultados contrastados y se confirmaron vías de acción distintas a las de los fármacos basados en el platino. Por ejemplo, la muerte celular puede ser independiente del daño al ADN, mientras que los metalociclos pueden afectar a la actividad de varias enzimas redox e inducir el estrés del retículo endoplásmico. Adicionalmente, la actividad citotóxica de los compuestos con ligantes π-expansivos o con porfirinas aumentó notablemente tras la irradiación con luz visible. Estudios por EPR demostraron que la formación de oxígeno singlete es responsable de este efecto.

Se agradece el apoyo financiero por parte de DGAPA-UNAM (PAPIIT IN211522), ECOS-Nord (279063) y CONACyT (A1-S-15068).

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

II-486-O EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD CATALÍTICA DE G-C3N4 MODIFICADOS CON NI2+, MN2+ Y CU2+ PARA LA DEGRADACIÓN DE FÁRMACOS EN MEDIO ACUOSO.

Evaluación de la actividad catalítica de g-C_3N_4 Modificados con Ni^{2+}, Mn^{2+} y Cu^{2+} para la Degradación de Fármacos en Medio Acuoso.

Angie V. Lasso Escobar [a], Efraím A. Serna Galvis [a,b]*, Ricardo A. Torres Palma [a], Yenny P. Ávila Torres [a]*

[a] *GIRAB, Universidad de Antioquia UdeA, Colombia*
[b] *CATALAD, Universidad de Antioquia UdeA, Colombia*

**Autor de correspondencia:* efrain.serna@udea.*edu.co*, yenny.avila@udea.*edu.co*

Palabras Claves: Nitruros de Carbono; Fotocatálisis; Ciprofloxacina.

Los nitruros de carbono grafíticos (g-C_3N_4) son compuestos de creciente interés en la comunidad científica, estos materiales absorben a $\lambda \leq 460$ nm y su capacidad foto-catalítica está relacionada con el potencial redox de su banda de valencia y conducción. Esta tendencia para oxidar o reducir moléculas orgánicas, puede modificarse incorporando metales de transición enlazados de forma coordinada al g-C_3N_4, los cuales pueden mejorar sus capacidades de adsorción y sus capacidades fotocatalíticas [1]. Por otro lado, el constante vertimiento de fármacos al ambiente provoca efectos nocivos, demandando nuevas estrategias para su eliminación, donde la fotocatálisis con g-C_3N_4 como proceso de oxidación avanzada (POA) tiene una oportunidad. En este trabajo se sintetizó g-C_3N_4 a 550°C y se modificó con Ni^{2+}, Mn^{2+} y Cu^{2+} a pH 6 y 11. Posteriormente, los catalizadores se caracterizaron mediante técnicas espectroscópicas (UV-Vis, IR, XPS, DRX, VC, IE) relacionando sus capacidades adsorbentes y electrónicas hacia la degradación de ciprofloxacina (CIP, un fármaco de alto interés ambiental). Los índices de sinergia (fotocatálisis de CIP vs. fotólisis y adsorción) obtenido a 60 min de tratamiento, en una coordinación periférica de Ni^{2+}, Mn^{2+} y Cu^{2+} sobre g- C_3N_4 fueron 1.3, 1.2 y 1.2, respectivamente, (Figura 1a, 1b, 1c). Las tres modificaciones a pH básico en la síntesis, indican que, en estos materiales la banda de valencia y de conducción fueron mejoradas, favoreciendo la degradación fotocatalítica de ciprofloxacina en agua bajo luz visible.

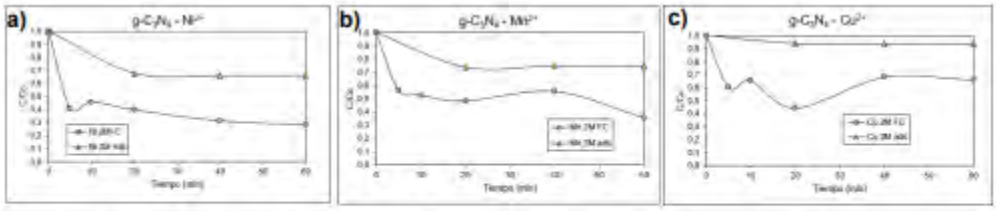


Figura 1. *a) Degradación de CIP por fotocatálisis (FC) y control de adsorción (ads) a). Ni^{2+}, b) Mn^{2+}, c) Cu^{2+}.*

Referencias: [1] H. Sun et al., Sep. Purif. Technol., vol. 299, no. May, p. 121771, 2022, doi: 10.1016/j.seppur.2022.121771.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Metalofarmacos. Metales Pesados: ¿Amigos o Enemigos?

Dr. David Morales-Morales

damor@unam.mx
Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Cd. Universitaria, Circuito Exterior S/N, Coyoacán C.P. 04510, Ciudad de México, Mexico

La presente charla examinara el uso de metales pesados, particularmente del grupo del platino, para su empleo, de manera sinérgica, con ligantes derivados de productos naturales para su uso como metalofármacos para el tratamiento de enfermedades como el Cancer.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck y reacciones de alquilación de metilcetonas con complejos de paladio con ligantes azoazometinonitrofenilpirazol

Fernando Cuenú Cabezas

Laboratorio de Química Inorgánica y catálisis, Programa de Química, Universidad del Quindío.
fercuenu@uniquindio.edu.co

Palabras Claves: Paladio(II), Alquilación, Mizoroki-Heck, azoazometinonitrofenilpirazol, DRX

Se presentan los resultados de la síntesis y caracterización de complejos de paladio(II) del tipo $[PdCl_2(azopz)]_2$, donde azopz son iminoazonitropirazoles, con los sustituyentes cloro, metil, metoxi, compuestos orgánicos considerados de gran interés por sus excelentes propiedades biológicas y farmacéuticas, además forman complejos de paladio con propiedades catalíticas que permiten realizar sus reacciones en medio acuoso y sus propiedades biológicas son de gran interés. Los azopirazoles y sus complejos de paladio se caracterizaron por diferentes técnicas espectroscópicas tales como IR, RMN, UV-vis, análisis elemental, espectrometría de masas y difracción de rayos X.

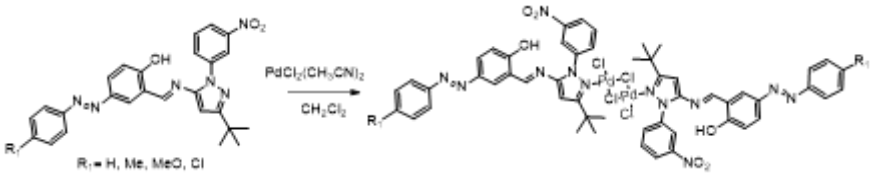


Figura 1. Síntesis de los complejos del tipo $[Pd(Cl)_2(azoPz)]_2$

Los estudios de las reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck, muestran que los complejos son activos y regioselectivos hacia el *trans*-estirilbenzaldehído, aun en medio acuoso. En las reacciones de alquilación de las metilcetonas (acetofenona, 4-metilacetofenona, 4-metoxiacetofenona y 4-nitroacetofenona) y alcohol bencílico, con los complejos aquí sintetizados, mostraron una alta actividad y selectividad, y el seguimiento de la reacción indica que inicialmente se forma la chalcona y posteriormente se produce su hidrogenación a través de una reacción de transferencia de hidrógeno, finalmente a altas temperaturas se produce la hidrogenación del grupo carbonilo.

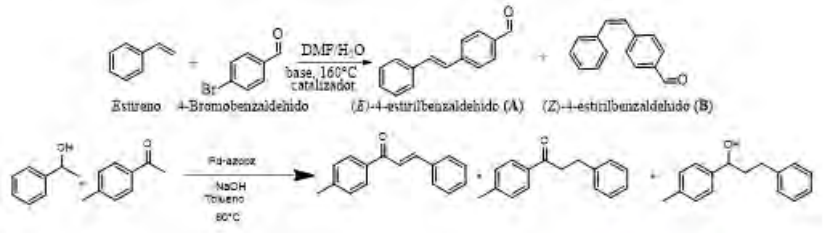


Figura 2. Reacciones de acoplamiento C-C con complejos del tipo $[Pd(Cl)_2(azoPz)]_2$

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Estudios en disolución y evaluación de la actividad antimicrobiana de complejos de Cu(II)

Acosta-Encinas, M.D.[1], Gomez-Vega, P.J.[2], Ochoa-Lara, K. L.[2], Moreno-Corral, R. A.[2], Juárez, J.[3], Álvarez-Ainza, M. L.[1], Morales-Morales, D.[4], Reyes-Márquez, V[1].

[1] Departamento de Ciencias Químico Biológicas, Universidad de Sonora
[2]Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora
[3]Departamento de Física, Universidad de Sonora
Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior s/n, Ciudad Universitaria, C.P. 04510, Ciudad de México, México e-mail: viviana.reyes@unison.mx

Según la Organización Mundial de la Salud, el incremento en la frecuencia con la que se presentan casos de cepas multirresistentes es un problema de salud pública que debe atenderse de inmediato. De acuerdo con los reportes recientes, existen varias razones por las cuales la multiresistencia de bacterias ha aumentado considerablemente, sin embargo, uno de los más importantes es la facilidad con la cual estos microorganismos se adaptan y evaden los mecanismos de acción de los antibióticos tradicionales. Al respecto, la síntesis de compuestos principalmente de tipo orgánico para su aplicación en áreas biológicas como la microbiología ha sido objeto de estudio en diferentes campos de la ciencia, sin embargo, recientemente el desarrollo de compuestos que contienen metales ha destacado favorablemente, ya que se ha logrado evidenciar que, de forma predominante, estos tienen mejores actividades microbiológicas que sus homólogos sin el metal, ejemplo de esto es la modificación de los antibióticos cloroquina y norfloxacina a los cuales se les incluyó hierro y bismuto respectivamente con evidentes mejoras en su actividad antimicrobiana. Derivado de esto, el diseño y la preparación de compuestos que exhiban mejores comportamientos como agentes antimicrobianos y mejoren las opciones terapéuticas es un gran reto. Considerando esto, resulta relevante continuar con la búsqueda de nuevas opciones que pongan remedio a este problema que impacta de manera importante el área de la salud.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA MEDICINAL

XV-143-O ***SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE ESTRUCTURAS METAL-ORGÁNICAS DE COBRE (CUMOFS) EMPLEANDO UN PÉPTIDO SINTÉTICO COMO BIO-LIGANDO PARA APLICACIONES EN LA ENTREGA DE FÁRMACOS***

Síntesis y Caracterización de Estructuras Metal-Orgánicas de Cobre (CuMOFs) Empleando un Péptido Sintético como Bio-ligando para Aplicaciones en la Entrega de Fármacos

Yuly A. Prada *[a], Mariam D. Hernández [a], Yuliany Guillín [b], Claudia C. Ortiz [b], Enrique Mejía [a]

[a] Laboratorio de Espectroscopía Atómica y Molecular (LEAM), Universidad Industrial de Santander, Colombia.
[b] Grupo de Investigación en Bioquímica y Microbiología (GIBIM), Universidad Industrial de Santander, Colombia.

*Yuly A. Prada: *yupravar@correo.uis.edu.co*

Palabras Claves: Estructuras Metal-Orgánicas; MOFs; péptidos; bio-ligandos.

El uso de biomoléculas como azúcares, aminoácidos y péptidos cortos como bio-ligandos en la formación de estructuras MOFs ha permitido la exploración de nuevas aplicaciones a nivel biológico. La alta biocompatibilidad, porosidad y estabilidad otorgada por dichos bio-ligando facilita su uso como plataformas de entrega de fármacos. Bajo estas consideraciones, se diseñó y sintetizó un tetra-péptido de secuencia CEGH, cuyo residuo de histidina fue incluido con el fin de orientar el enlace de coordinación con el Cu y el grupo imidazol de su cadena lateral, para así da lugar a estructuras MOFs más estables y rígidas. El péptido CEGH fue obtenido químicamente empleando la metodología de síntesis de péptidos en fase sólida (SPPS) por la estrategia del grupo Fmoc. Posteriormente, el péptido fue caracterizado por espectrometría de Masas MALDI-TOF para confirmar su estructura primaria. Finalmente, el péptido fue usado como bio-ligando en la síntesis solvotérmica de una estructura CuMOFs@CGEH. En este sentido, la reacción se llevó a cabo a 85ºC durante 11 horas, empleando como solvente una mezcla metanol-agua (1:1) y $CuNO_3 \square 2H_2O$ como precursor metálico. Los cristales azul prismáticos obtenidos por recristalización correspondientes al CuMOFs@CEGH se caracterizaron por difracción de rayos X (DRX) en polvo, dispersión de la luz en modo dinámico (DLS). En la ***figura 1,*** presentan los resultados de DRX en donde se evidencia un patrón de difracción de una estructura MOFs con un diámetro de partícula promedio de 383.39 nm ± 18 nm.

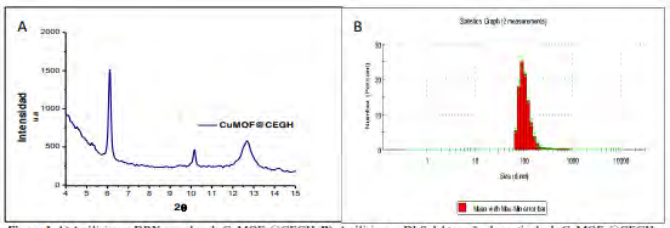


Figura 1. **A)** Análisis por DRX en polvo de CuMOFs@CEGH. **B)**. Análisis por DLS del tamaño de partícula de CuMOFs@CEGH.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

El Gas Radón y sus Efectos en la Salud Humana

Gustavo Garzón[a,b*], Sonia Salazar[b]

[a] *Servicio Geológico Colombiano SGC, Dirección Técnica de Laboratorios, Cali, Colombia*
[b] *Centro de Aplicaciones Fisicoquímicas en el Entorno, Grupo de Investigación FISQUIM, Cali, Valle*
** Autor de correspondencia: ggarzon@sgc.gov.co*

Palabras Claves: Hormesis; Radón; Radiación; Salud; Cáncer.

La palabra hormesis del griego *ορμος* "*hormos*" que significa "excitar", es la estimulación de cualquier agente bioactivo en el cuerpo humano. Desde la remota antigüedad, los naturalistas y padres de la medicina como Tito Lucresio, Paracelso e Hipócrates afirmaron que "la dosis hace al remedio o al veneno". En la vida práctica hemos aprendido a conocer que algunos elementos químicos, conocidos como oligoelementos, son necesarios en pequeñas dosis en nuestro organismo; pues el exceso de las dosis puede resultar nocivo.

El radón, es un elemento químico perteneciente al grupo de los gases nobles. Es un gas que sale del interior de la Tierra a través de las fracturas en las rocas e incluso puede ingresar y acumularse en las viviendas, donde sus residentes lo pueden respirar. Dada su naturaleza inestable, se desintegra naturalmente produciendo partículas *alfa*, las cuales pueden bombardear los alvéolos pulmonares, produciendo al cabo de varios años, tumores e incluso cáncer de pulmón. Sin embargo, es conocido también que exposiciones a ciertos niveles de gas radón, según la medicina tradicional muy antigua en países euroasiáticos, produce estados de relajación y excitación. En Europa y Asía existen centros especializados para el tratamiento de ciertas afecciones, tipo artritis, aplicando específicas dosis del gas radón.

Se presentan en el XIX CCQ algunos resultados de las mediciones del gas radón en varios ambientes subterráneos en territorio colombiano, donde se explicarán ejemplos de usos que en varios países dan a sus sistemas subterráneos para tratamientos terapéuticos. Se mostrarán representaciones 3D del interior de algunas cuevas, cavernas y minas abandonadas de los departamentos del Putumayo, Huila, Santander, Tolima, Antioquia y Valle del Cauca, con diversos niveles del gas radón y galerías de especial acumulación, los cuales podrían ser potenciales espacios para futuros tratamientos especializados. Igualmente se mostrarán resultados de investigaciones realizadas en interiores de viviendas en el municipio de Manizales, donde se destacan algunos niveles que podrían resultar nocivos para la salud de sus residentes.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XV-145-O ***EFECTO ANTIPROLIFERATIVO DE EXTRACTOS DE IPOMOEA BATATAS (L.) LAM. (CONVOLVULACEAE) SOBRE CÉLULAS CANCERÍGENAS ORALES***

Efecto Antiproliferativo de Extractos de *Ipomoea batatas* (L.) Lam. (Convolvulaceae) Sobre Células Cancerígenas Orales

José A. Salgado [a]*, **Óscar M. Mosquera** [a], **Luz S. Ramírez** [b], **Fernanda Visioli** [c]

a. *Grupo de Investigación Biotecnología-Productos Naturales, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.*
b. *Grupo de Investigación Polifenoles, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.*
c. *Departamento de Patología Oral, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil.*
** Autor de correspondencia: j.salgado@utp.edu.co*

Palabras Claves: Polifenoles; Citotoxicidad; Cáncer oral; Fitoquímica.

El cáncer oral se sitúa como el sexto tipo de cáncer más común a nivel mundial. El efecto antiproliferativo de los extractos de *Ipomoea batatas* (batata) sobre diversas líneas cancerígenas ha sido establecido y se atribuye a su contenido de compuestos fenólicos. La comunidad Wayúu, ubicada en el departamento de La Guajira (Colombia) ha reportado el uso tradicional de la batata en el tratamiento del cáncer de boca; sin embargo, no se conocen reportes científicos al respecto. Se seleccionaron extractos metanólicos obtenidos de hojas de plantas de batata con dos (R7), tres (R8) y seis (R11) meses de cultivo bajo las condiciones ambientales de Riohacha (La Guajira) y se determinó su efecto antiproliferativo a diferentes concentraciones (0,0; 0,25; 0,5 y 1,0 $mgmL^{-1}$) y dos tiempos de exposición (24 y 48 horas) sobre células cancerígenas orales (líneas celulares SCC9, Cal27). Las células fueron sembradas en placas de 96 pozos a razón de 5 x 10^3 células/pozo en medio DMEM alto en glucosa, suplementado con suero fetal bovino y se incubaron a 37 °C y 5% de CO_2 por 24 horas, previo a la aplicación de los extractos. La proliferación celular se estableció usando el método de la sulforodamina B y los extractos se analizaron mediante cromatografía de capa delgada, para obtener un acercamiento preliminar a su constitución fitoquímica. Los resultados indicaron que los extractos inhibieron el crecimiento en todas las líneas celulares evaluadas. El máximo efecto citotóxico se evidenció a las 48 horas, los valores de inhibición superaron el 80% en comparación con los controles y los extractos afectaron de manera diferencial a las líneas celulares. La línea celular SCC9 fue afectada en mayor medida por el extracto R7 (DL_{50}= 0,46 $mgmL^{-1}$), mientras que la línea celular Cal27 fue más susceptible al extracto R11 (DL_{50}= 0,49 $mgmL^{-1}$). El análisis cromatográfico permitió identificar la presencia de ácidos fenólicos, flavonoles, flavononas, sesquiterpenos, diterpenos, carbohidratos, cumarinas y antraquinonas. Con la realización de la presente investigación se confirma la actividad antiproliferativa de la batata contra células cancerígenas orales, al tiempo que se aprovecha y promueve el uso del conocimiento ancestral de la cultura Wayúu.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XV-146-O ***GENERACIÓN DE MODULADORES ALOSTÉRICOS POSITIVOS PARA EL RECEPTOR NICOTÍNICO DE ACETILCOLINA SUBTIPO A7 HUMANO. UNA ALTERNATIVA EN EL TRATAMIENTO DE LA ENFERMEDAD DE ALZHEIMER.***

Generación de Moduladores Alostéricos Positivos para el Receptor Nicotínico de Acetilcolina Subtipo α7 Humano. Una Alternativa en el Tratamiento de la Enfermedad de Alzheimer

Jhon J. López [a]*, Franco Viscarra [b,c], Juan F. Chrestia [d], Yaima Sanchez [a], Edwin G. Pérez [d], Cecilia Bouzat [e], Isabel Bermudez [b], Philip C. Biggin [c]

[a] *Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Concepción, Chile.*
[b] *Departamento de Biología y Ciencias Médicas, Universidad de Oxford Brookes, Reino Unido.*
[c] *Departamento de Bioquímica, Universidad de Oxford, Reino Unido.*
[d] *Facultad de Química y Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile, Chile.*
[e] *Instituto de Investigaciones Bioquímicas de Bahía Blanca, Universidad Nacional del Sur, Argentina.*

**Autor de correspondencia: jhonlopez@udec.cl*

Palabras Claves: Receptor Nicotínico; Síntesis Química; Actividad biológica; Estudios Computacionales.

Los Receptores Nicotínicos de Acetilcolina (RnACo) subtipo α7 son proteínas localizadas en el sistema nervioso central implicadas en funciones cognitivas y de memoria, las cuales estarían implicados en la enfermedad de Alzheimer (EA).

El propósito de este trabajo consistió en explorar el rol de sustituyentes hidrofóbicos e hidrofílicos en posición 5 y 6 respecto al anillo de piridina del agonista AQW051 y ver los efectos funcionales sobre la propiedad agonista de este. Se sintetizaron seis nuevos ligandos (**4**-**9**), a los cuales se les determinó la actividad biológica usando registros electrofisiológicos de fijación voltaje con dos electrodos y canal unitario, donde sorpresivamente los ligandos **6**, **8** y **9** se comportaron como moduladores alostéricos positivos tipo (MAPs) I con eficacia y potencia variables. El ligando **6** fue el más potente y eficaz con una EC_{50} estimada para la potenciación de 12,6 ± 3,32 µM y una potenciación máxima de las respuestas de ACh EC_{20} de 850 ± 120 %. Por otra parte, estudios computacionales revelaron la preferencia del ligando **6** por un sitio alostérico en el dominio transmembrana y algunas interacciones claves que explicarían los diferentes perfiles de los ligandos sintetizados. Finalmente, estudios de citotoxicidad realizados al ligando **6**, indicaron que no es tóxico, mientras que estudios de citoprotección revelaron que es capaz de inhibir el plegamiento del péptido β-amiloide (Aβ) determinante en la aparición de EA. Nuestros resultados sugieren que el ligando **6** sería una plantilla ideal para el diseño de nuevos MAPs sobre el subtipo α7, los cuales a diferencia de los agonistas mantendrían los patrones temporales y espaciales normales de la neurotransmisión, convirtiéndolos en candidatos para el tratamiento de enfermedades neurodegenerativas como la EA.

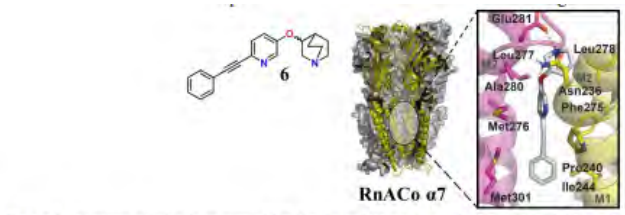


Figura 1. Estructura química de un nuevo MAP tipo I y su interacción en el sitio alostérico del RnACo α7.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XV-147-O ***DISEÑO DE ANÁLOGOS QUINOLÍNICOS METOXILADOS CON POTENCIAL LEISHMANICIDA Y ANTI-TRYPANOSOMA CRUZI***

Diseño de Análogos Quinolínicos Metoxilados con Potencial Leishmanicida y Anti-Trypanosoma *Cruzi*

Karina A Causil [a*], **Sara M Robledo**[b], **Roger D Espinosa**[a], **Fernis J Marin**[a], **Camilo Guzmán**[a]

[a]*Laboratorio de investigación IDEFARMA, Universidad de Córdoba, Colombia*
[b]*PECET, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia*

** Autor de correspondencia: Kcausilespitia94@correo.unicordoba.edu.co*

Palabras Claves: Actividad leishmanicida; 2-estirilquinolinas; citotoxicidad; enfermedad de Chagas.

La leishmaniasis y la enfermedad de Chagas (EC), son enfermedades endémicas desatendidas con opciones de tratamientos limitadas por alta toxicidad sistémica, graves efectos adversos, eficacia variable, y la aparición de cepas resistentes, por lo tanto, la búsqueda de nuevas alternativas de tratamientos ha centrado la atención de los investigadores en moléculas con núcleo quinolínico, las cuales han destacado por sus múltiples propiedades biológicas y/o farmacológicas, entre las que está, la actividad antiprotozoario. En el presente estudio se sintetizaron cinco (5) análogos 2-quinolínicos metoxilados los cuales se evaluaron frente a cepas de parásitos de *Leishmania braziliensis y Trypanosoma cruzi*. Las moléculas se obtuvieron por síntesis orgánica a partir quinaldina y 8-hidroxiquinaldina con diferentes aldehídos aromáticos metoxilados, el potencial leishmanicida *in vitro* se determinó empleando citometría de flujo, mientras que la actividad antitripanosómica se evaluó sobre la cepa *T. cruzi* utilizando el método enzimático de *β*-galactosidasa, para evaluar la citotoxicidad se empleó el micrométodo del MTT. Las estructuras de los compuestos se confirmaron empleando Resonancia Magnética Nuclear (RMN) en 1D y 2D y espectrometría de masas (EM). Los análogos quinolínicos (**1**-**5**) se obtuvieron con rendimientos desde 16% hasta 29%, todos los compuestos a excepción del **3** mostraron citotoxicidad con valores de concentración letal media (CL_{50}) que van de 10.8 a 33.9 µg/mL, en cuanto a la actividad leishmanicida, los compuestos **1**, **2** y **4** mostraron alta actividad con valores de concentración efectiva media (CE_{50}) de 4.69, 2.81 y 9.17 µg/mL respectivamente e índice de selectividad (IS) mayor a uno, el análogo **3** demostró baja actividad (CE_{50} >50 µg/mL) y el **5** no mostró actividad (CE_{50} >100 µg/mL), comparados con el medicamento control Anfotericina B con CE_{50} de 0.3 µg/mL, para la actividad anti-*T. cruzi*, los compuestos **2** y **5** mostraron moderada actividad (CE_{50} >25 µg/mL) y **1** y **4** alta actividad con CE_{50} de 15,6 en ambos compuestos y **3** baja actividad (CE_{50} >50 µg/mL). Se pueden considerar compuestos promisorios para la actividad leishmanicida, **1**, **2** y **4** y para la actividad anti-trypanosoma el compuesto **4**, para continuar con estudios *in vivo* que permita validar la actividad biológica de los compuestos.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XV-149-O ***PERFIL ANTICONVULSIVANTE EN RATONES CD-1 DE DERIVADOS DE ISOBENZOFURANONA PROVENIENTES DEL DIFAC***

Perfil Anticonvulsivante en Ratones CD-1 de Derivados de Isobenzofuranona Provenientes del DiFAC

Juan S. Carrero [a], Adriana M. Pardo [a], Paola A. Cuervo [b], Fabián Orozco [b], Christian Becerra [b] Mario F. Guerrero [a]*

[a] *Dpto. Farmacia, Universidad Nacional de Colombia, Colombia*
[b] *Dpto. Química, Universidad Nacional de Colombia, Colombia*
* *Autor de correspondencia: mfguerrerop@unal.edu.co*

Palabras Claves: anticonvulsivante; DiFAC; isobenzofuranonas

En este estudio se evaluó la actividad anticonvulsivante de los derivados de isobenzofuranona IBF-0, M-125 y M-120 (Figura 1), seleccionados a partir de cribado virtual frente al canal de sodio dependiente de voltaje NaV1.2; en los modelos de electroshock máximo, convulsiones inducidas por pentilentetrazol (PTZ) y estimulación eléctrica umbral de 6 Hz en ratones CD-1 machos y hembras (n=6/género). Los compuestos fueron evaluados inicialmente a intervalos de dosificación entre 100 y 600 mg/kg según la respuesta obtenida, encontrándose un efecto protector dosis-respuesta con el compuesto IBF-0 en el modelo de electroshock en ratones macho. Así mismo, se determinó la dosis efectiva media (DE_{50}) de IBF-0 en este modelo, mediante una metodología arriba-abajo con el fin de reducir el número de animales empleados (n=12), obteniendo un valor de 237 mg/kg (207-266 mg/kg). Adicionalmente, se evaluó el posible efecto motor neurotóxico agudo de los compuestos a las dosis de tamizaje a través del ensayo del eje rodante, en el que ninguno de los compuestos redujo significativamente el tiempo de permanencia de los ratones sobre el mismo a las dosis evaluadas. Los resultados obtenidos muestran actividad anticonvulsivante del compuesto IBF-0, que estaría vinculada con interacciones sobre el canal de sodio dependiente de voltaje NaV1.2, sin ejercer efectos neurotóxicos agudos sobre la actividad motora.

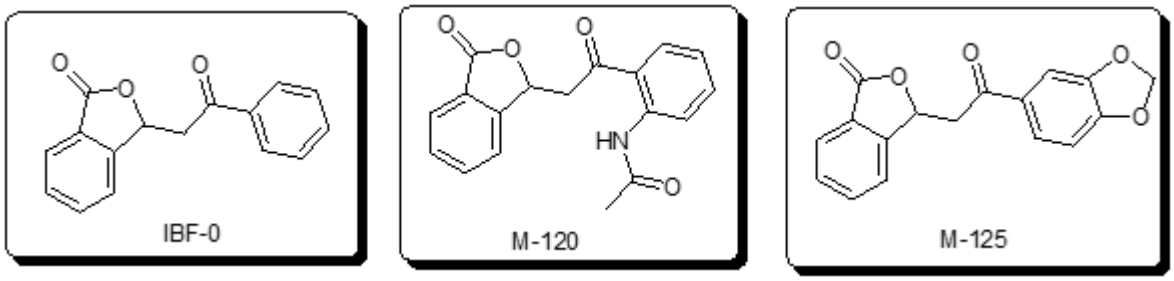


Figura 1. Estructuras de los compuestos evaluados.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XV-150-O ***EFECTO DE LOS PÉPTIDOS ATRA-1, LL-37 Y DAPTOMICINA SOBRE EL COMPORTAMIENTO TERMOTRÓPICO DE MODELOS REPRESENTATIVOS DE LA MEMBRANA DE STAPHYLOCOCCUS AUREUS.***

Efecto de los Péptidos ATRA-1, LL-37 y Daptomicina sobre el Comportamiento Termotrópico de Modelos Representativos de la Membrana de *Staphylococcus aureus*

Jessica M. Múnera-Jaramillo [a], Marcela Manrique-Moreno [a]*

[a] *Instituto de Química, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia, Colombia*
* *Autor de correspondencia:* marcela.manrique@udea.edu.co

Palabras Claves: Péptidos antimicrobianos, modelos lipídicos, *S. aureus*, temperatura de transición, membranas biológicas.

Staphylococcus aureus (*S. aureus*) es un patógeno responsable de numerosas infecciones a nivel clínico, conocido por su habilidad de adquirir faramacorresistencia [1]. Los péptidos antimicrobianos (PAMs) son moléculas bioactivas que aparecen como una alternativa prometedora en el desarrollo de nuevos agentes terapéuticos para el tratamiento de infecciones, debido a que ejercen su actividad a nivel de membrana a través de una amplia diversidad de mecanismos [2]. Por lo tanto, el estudio de la interacción de los PAMs con membranas biológicas es fundamental para entender su modo de acción.

Con el fin de investigar el efecto de ATRA-1, LL-37 y Daptomicina en las propiedades termotrópicas de modelos lipídicos de membranas de *S. aureus*, se evaluaron diferentes concentraciones de los péptidos en un sistema basado en fosfatidilglicerol (PG) y cardiolipina (CL) en proporciones 80:20, así como los lípidos individuales. Para esto, se hizo el seguimiento de la temperatura de transición (T_m) de los sistemas lipídicos, usando un equipo de espectroscopia infrarroja Tensor II de Bruker acoplado a una celda BioATR II y un detector MCT. Los sistemas representativos se obtuvieron preparando bicapas soportadas a partir de soluciones de cada fosfolípido en $CHCl_3$. Posteriormente, se hidrataron las bicapas con buffer (Hepes 20 mM, NaCl 50 mM y EDTA 1 mM, pH 7.4) el cual contenía concentraciones variables de los péptidos. Los experimentos fueron realizados en un rango de 10 a 50 °C, con una rampa de calentamiento de 1 °C/min.
Los resultados muestran que el incremento gradual de la concentración de los péptidos induce la disminución de la T_m de los sistemas lipídicos, observándose un mayor efecto en los sistemas de PG. Por otro lado, el comportamiento termotrópico de los sistemas en presencia de los tres péptidos es consistente con el mecanismo de acción reportado para los mismos; alfombra para ATRA-1, formación de poro para LL-37 e inserción para Daptomicina. Estos resultados permiten validar y complementar los estudios relacionados con el mecanismo de acción de estos agentes a nivel de membrana.

Referencias

[1] G.Y.C. Cheung, J.S. Bae, M. Otto, Pathogenicity and virulence of Staphylococcus aureus, Virulence, 12 (2021) 547-569.
[2] O.G. Travkova, H. Moehwald, G. Brezesinski, The interaction of antimicrobial peptides with membranes, Adv Colloid Interface Sci, 247 (2017) 521-532.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XV-151-O DESARROLLO DE ANDAMIOS FLEXIBLES DE POLICAPROLACTONA/NANOTUBOS DE CARBONO PARA SER UTILIZADOS EN RECUPERACIÓN DE LA FUNCIÓN CONTRÁCTIL, ENSAYADOS EN MÚSCULO ESTRIADO

Desarrollo de Andamios Flexibles de Policaprolactona/nanotubos de Carbono para ser Utilizados en Recuperación de la Función Contráctil, Ensayados en Músculo Estriado

José Peñaranda-Armbrechtc[a*]; Julio C. Caicedo[b]; Paola A. Neuta[a]; Jose O. Gutiérrez[a]

[a] *Grupo de farmacología, Universidad del Valle, Colombia*
[b] *Grupo de trobología, Universidad del Valle, Colombia*
* *Autor de correspondencia: jose.penaranda@correounivalle,edu.co*

Palabras Claves: andamios; Policaprolactona; falla cardiaca; nanotubos

Las enfermedades cardiovasculares (ECV) constituyen un problema creciente en el mundo, con 623 millones de personas afectadas por esta enfermedad prevenible en el año 2023. Una de las soluciones, en investigación, es el desarrollo de andamios que den soporte a las células musculares contráctiles, con el objetivo de recuperar la función celular en una matriz extracelular (MEC) destruida por alguna enfermedad o lesión, sin producir respuesta inmune. Por lo anterior, se logró la funcionalización de las PCL comercial y sintética con los nanotubos de carbono (MWCNT), resultando en membranas cuyo acoplamiento químico fue verificado mediante RAMAN. Los acoplamientos más adecuados fueron al 1%, 3% y 5% de NWCNT respecto a la PCL. En general, las durezas encontradas para los andamios mediante nanoindentación fueron muy elevadas (10-12 GPa), significando que son estables al momento de ser implantados. El andamio de $PCL_{(C)}$/MWCNT 5%, fue el más flexible y menos resistente. En las fracturas, los andamios presentaron hilos, posiblemente porque los MWCNT actuaron como refuerzo ante una posible ruptura. Además, este $PCL_{(C)}$/MWCNT 5% tuvo una porosidad con tamaño de poro e interconectividad adecuada para el anclaje de las células musculares, además presentó una conductividad también adecuada para la posible recomposición del tejido. Es más, el mencionado andamio tuvo baja citotoxicidad, con una viabilidad celular de 90% aunque todos los andamios mostraron viabilidad hasta por 15 días de haber implantado las células diferenciadas. En suma, en este trabajo se desarrollaron andamios flexibles de PCL/nanotubos de carbono de pared múltiple (MWCNT) que permitieron servir como soporte a células de músculo estriado, comprobando su respuesta mecánica y eléctrica, y con una flexibilidad, elasticidad similar al tejido circundante. Finalmente, la implantación de los andamios en músculo EDL de biomodelos murinos fue exitosa, ya que hubo integración al tejido sin respuesta inflamatoria después de 10 días; las pruebas de contracción muscular más exitosas ocurrieron con los andamios $PCL_{(C)}$/MWCNT 5% (figura 1).

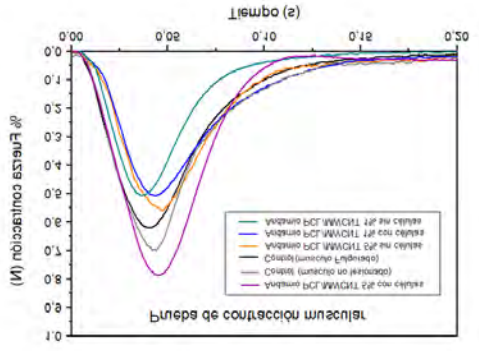


Figura 1. Pruebas de contracción muscular en musculo EDL de biomodelos murino

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XV-152-O ACTIVIDAD ANTIPERIODONTAL DE UN EXTRACTO CRUDO OBTENIDO DE LOS RESIDUOS DE LA INDUSTRIA MICRO CERVECERA

Actividad Antiperiodontal de un Extracto Crudo Obtenido de los Residuos de la Industria Micro Cervecera

Osnaider E. Cifuentes-Cita [a, b], Nubia Y. Piñeros-Castro [c], Jean C. Villamil-Poveda [b]
Mayra A. Téllez-Coral [b], Sandra J. Gutiérrez-Prieto [b], Luis G. Sequeda-Castañeda [a, b, *]

[a] *Grupo de Investigación Fitoquímica Pontificia Universidad Javeriana, Pontificia Universidad Javeriana, Colombia*
[b] *Centro de Investigaciones Odontológicas, Pontificia Universidad Javeriana, Colombia*
[c] *Investigación en Ingeniería de Procesos y Sistemas Industriales, Universidad Jorge Tadeo Lozano, Colombia*

* Autor de correspondencia: lsequeda@javeriana.edu.co

Palabras Claves: Actividad antiperiodontal; biomasa; *Candida albicans*; *Candida guilliermondii*; *Fusobacterium nucleatum*; residuo lignocelulósico.

La enfermedad periodontal es ocasionada por un desequilibrio en el microbiota oral debido a diferentes factores desde el desarrollo de enfermedades crónicas como la diabetes hasta los malos hábitos de higiene oral. Se estima que aproximadamente el 90 % de la población mundial posee la enfermedad en algún grado de desarrollo, junto con la falta de accesibilidad a tratamientos oportunos de tipo farmacológico profiláctico y la disminución de la efectividad de algunos fármacos utilizados como coadyuvantes en el tratamiento de esta patología, hacen que la búsqueda de nuevos agentes terapéuticos y/o alternativos sea relevante. A partir de los residuos lignocelulósicos generados por la industria micro cervecera y mediante un proceso fermentativo se obtuvo un extracto crudo al cual se de le determinó la actividad antiperiodontal usando el método de microdilución. Como controles positivos se usaron Clorhexidina y Metronizado, como controles negativos agua acidulada y etanol-agua. Los resultados del extracto crudo muestran actividad antiperiodontal contra *Fusobacterium nucleatum* (56.1% de inhibición) mientras que en *Candida albicans* fue del 32.2%. En el perfilamiento del extracto crudo por CG-MS y HPLC-MS se identificaron tentativamente compuestos como glucosa, xilosa, xilitol, furfural y azúcares reductores entre otros compuestos. En conclusión, el extracto obtenido a partir del afrecho de la industria cervecera por fermentación microbiológica muestra actividad antiperiodontal contra *Fusobacterium nucleatum* y *Candida albicans*.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Del Diseño In-Silico A La Comprobación In-Vitro: Implementación De LBVS y SBVS

James Guevara-Pulido[a]

[a] *Grupo de Investigación INQA, Química Farmacéutica, Universidad El Bosque, Bogotá, Colombia*
* *joguevara@unbosque.edu.co*

Palabras Claves: Drug Discovery, Diseño Racional, SBVS, LBVS

Resumen.
Los procesos tradicionales de descubrimiento de fármacos a menudo consumen mucho tiempo y son costosos; el desarrollo, aprobación y comercialización de un nuevo medicamento podría durar hasta 20 años y costar más de 2000 millones de dólares. De hecho, la cantidad de nuevos medicamentos introducidos en el mercado disminuye constantemente, generalmente debido a la seguridad clínica y preclínica y problemas de tolerabilidad, que representan alrededor del 40 % de la suspensión del fármaco. Para abordar este problema, el diseño racional de fármacos se ha convertido en un enfoque popular en los últimos años, ya que reduce los costos asociados con el descubrimiento de fármacos mediante el uso de técnicas in silico para producir moléculas más seguras, bien toleradas y más eficaces con menos efectos secundarios; aumentando así la tasa de éxito en el descubrimiento de fármacos. Por ejemplo, las herramientas in silico como la detección virtual (VS) aceleran el descubrimiento de fármacos al optimizar el diseño y la selección de nuevos candidatos a fármacos. Con este enfoque, el proceso se vuelve más sostenible y eficiente porque los compuestos principales se pueden sintetizar, caracterizar y probar in vitro e in vivo para obtener candidatos preclínicos más rápido y con menos recursos que con los enfoques tradicionales. Bajo este modelo presentamos cuatro casos éxitos desarrollados en nuestro laboratorio que iniciaron desde el diseño in-silico pasando por la síntesis química y su comprobación in-vitro disminuyendo costos y tiempo en el desarrollo de un inhibidor de la MPro de Sars-Cov-2, un nuevo fármaco ISRS menos citotóxico, un nuevo agente fotoprotector derivado del octinoxato con menor ecotoxicidad y un nuevo fármaco inhibidor de AKRIC3 para el tratamiento de cáncer de mama.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XV-394-O ***FLAVONA AISLADA DE CHROMOLAENA LEIVENSIS MUESTRA IMPORTANTE EFECTO ANTIINFLAMATORIO IN VIVO Y EN MODELO IN SILICO.***

Flavona aislada de *Chromolaena leivensis* muestra importante efecto antiinflamatorio *in vivo* y en modelo *in silico*.

Juan C. Mancipe [a], Oscar E. Rodríguez [b,c], Paola Borrego-Muñoz [c], Iovanna C. Castellanos Londoño [a], David Ramírez [d], Luis G. Piñeros [c], Luis M. Pombo [c]*

[a] Facultad de Ciencias Agropecuarias, Universidad de la Salle, Bogotá, Colombia.
[b] Facultad de Ingeniería, Universidad del Bosque, Bogotá, Colombia.
[c] Escuela de Medicina, Fundación Universitaria Juan N. Corpas, Bogotá, Colombia.
[c] Departamento de Farmacología, Facultad de Ciencias Biológicas, Universidad de Concepción, Chile.
** Autor de correspondencia: miguel.pombo@juanncorpas.edu.co*

Palabras Claves: Antiinflamatorio, *Chromolaena leivensis*, Izalpinina, Docking molecular, Dinámica molecular.

La inflamación es una reacción inmunológica localizada y no específica que ocurre en respuesta a daños tisulares, causando incremento del flujo sanguíneo, vasodilatación, extravasación de fluidos, aumento del metabolismo celular y liberación de mediadores de inflamación, lo cual produce a nivel local enrojecimiento, dolor, calor, hinchazón y limitación funcional en la exploración física. En este estudio, se aisló e identificó la flavona izalpinina (IZP) de las partes aéreas de *Chromolaena leivensis*, con el fin de evaluar su actividad antiinflamatoria en un modelo animal de inflamación aguda empleando λ-carragenina, determinando los niveles de creatina quinasa (CK) y mediante un análisis *in silico* por docking molecular y dinámica molecular comprender su mecanismo de acción sobre receptores implicados en el proceso inflamatorio (COX-2, HAase, 5-LOX, NOS, 5-PLA2).

La determinación estructural de IZP se llevó a cabo mediante técnicas espectroscópicas de EM y RMN (^{1}H, ^{13}C). Para la actividad antiinflamatoria se evaluaron en ratas Wistar (hembras) tres dosis: 10 mg/kg, 20 mg/kg y 40 mg/kg, los tratamientos se administraron por vía intraperitoneal (i.p.) una hora antes de la λ-carragenina (1 %) en la aponeurosis plantar de una pata. El edema plantar se midió por pletismometría a la 1, 3, 5 y 7 h después de la inyección del mucopolisacárido. Las mediciones se realizaron por triplicado. El análisis estadístico del porcentaje de inflamación se realizó mediante un ANOVA a dos vías y post hoc de Dunnett. Se consideró una diferencia estadística significativa para $p<0.05$.

Se encontraron diferencias significativas al evaluar el efecto antiinflamatorio de IZP a las tres concentraciones empleadas, con respecto al control negativo (DMSO 1%). A las dosis de 10 mg/kg y 20 mg/kg los niveles séricos de creatina quinasa (CK), mostraron una disminución importante con respecto al grupo tratado con DMSO al 1%, con niveles similares al grupo de animales sanos. Por último, los análisis de docking molecular muestran que la IZP tiene una fuerte afinidad de unión con las cinco proteínas implicadas en el proceso inflamatorio. El análisis mediante dinámica molecular permitió demostrar que los complejos ligando-proteína presentan una estabilidad aceptable, con valores de RMSD dentro del rango.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XV-407-O SÍNTESIS DE AMIDAS DERIVADAS DEL ÁCIDO 2-BENZOFURANILACÉTICO Y SU POTENCIAL ACTIVIDAD CITOTÓXICA FRENTE A LÍNEAS CELULARES TUMORALES K562 Y U937.

Síntesis de amidas derivadas del ácido 2-benzofuranilacético y su potencial actividad citotóxica frente a líneas celulares tumorales K562 y U937.

Camilo A. Mahecha-Mahecha[a]*, Paola Borrego-Muñoz[a], Xandy M. Rodríguez[a], Luis M. Pombo[a], Diego A. Gamba[b]

[a] *Grupo de Investigación en Farmacología Vegetal y Terapéuticas Alternativas - GIFVTA, Escuela de Medicina, Fundación Universitaria Juan N. Corpas, Bogotá, Colombia.*
[b] *Grupo de Investigación LSOBOC, Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia.*
* *Autor de correspondencia: camilo.mahecha@juanncorpas.edu.co*

Palabras Claves: Amidas; Actividad citotóxica; Benzofurano; Acoplamiento; Reordenamiento.

A nivel global, el cáncer está en aumento y es la causa principal de mortalidad. En América Latina y el Caribe, aproximadamente uno de cada 360 niños y adolescentes (29,000 casos) son diagnosticados con cáncer cada año. Los tipos más comunes son la leucemia linfoblástica aguda, el linfoma de Burkitt y el de Hodgkin, que abarcan el 60% de todos los cánceres infantiles. En los países más pobres de la región, la supervivencia de estos pacientes es del 20% debido a diagnósticos tardíos y falta de acceso a tratamientos oportunos, por lo cual, se hace necesario ampliar la investigación con el fin de plantear alternativas de tratamiento frente a estos tipos de cáncer. Por lo tanto, es crucial expandir la investigación para encontrar alternativas para tratar estos tipos de cáncer. Teniendo en cuenta lo anterior, este estudio se enfocó en la síntesis de derivados tipo amida del benzofurano y la evaluación de su actividad citotóxica sobre líneas de células tumorales del tipo Leucemia mielode y linfoma-monocítico.

Se han diseñado dos rutas de síntesis para obtener el ácido 2-benzofuranilacético, una molécula determinante en la producción de estos derivados. La primera ruta involucra una ciclación entre aldehído salicílico y bromoacetona, seguida de un reordenamiento como pasos clave. La segunda ruta se basa en un acoplamiento cruzado entre yodofenol y 3-butinol, catalizado por paladio, seguido de una oxidación. Así mismo, fueron sintetizados otros derivados como el ácido 2-benzofuranilpropanoico y el ácido 2-benzofuranilbutanoico. Posteriormente, se llevó a cabo una reacción de amidación para estos ácidos, lo que permitió obtener 9 compuestos de tipo amida (**Figura 1**). La evaluación de la actividad citotóxica se realizó por el método del MTT sobre líneas celulares K563 (Leucemia mielode–eritroleucemia) y U937 (línea celular tipo linfoma-monocítico); el cálculo del valor de IC_{50} se realizó por medio de una regresión no lineal.

Ambas rutas sintéticas fueron eficaces, la primera ruta permitió una producción a mayor escala con una masa de 4 gramos y se encontró que los compuestos con mayor actividad citotóxica mostraron valores de IC_{50} cercanos a 50uM sobre la línea K563.

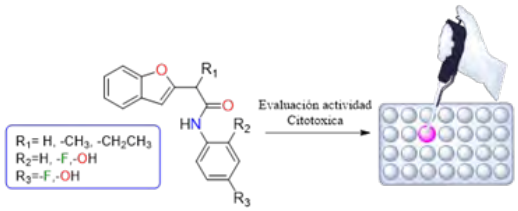


Figura 1. Amidas derivadas de benzofurano.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Contenido de cannabinoides e inhibición de acetilcolinesterasa, de extractos etanólicos de *Cannabis sativa* no psicoactiva cultivada en el Cauca

Sandra M, Muñoz [a*], Ricardo B, Benítez [b], Paola A, Arango [c]

[a] *Química de Productos Naturales, Universidad del Cauca, Colombia*
[b] *Química de Productos Naturales, Universidad del Cauca, Colombia*
[c] *Química de Productos Naturales, Universidad del Cauca, Colombia*
* *Autor de correspondencia:* marcelamb@unicauca.edu.co

Palabras Claves: *Cannabis*; Cannabinoides; terpenoides; antioxidante; acetilcolinesterasa

En la planta de *Cannabis sativa L.* destacan los cannabinoides y terpenoides, los cuales son metabolitos secundarios que se concentran en los tricomas de las inflorescencias femeninas. Los cannabinoides han llamado la atención debido a sus propiedades farmacológicas, que pueden potenciarse con otros metabolitos en lo denominado efecto séquito. En esta investigación se optimizó la extracción de los cannabinoides: Cannabidiol (CBD), ácido cannabidiólico (CBDA), cannabidivarina (CBDV), tetrahidrocannabinol (THC), ácido tetrahidrocannabidiólico (THCA), tetrahidrocannabivarina (THCV), cannabicromeno (CBC), cannabigerol (CBG) y ácido cannabigerólico (CBGA), utilizando los métodos maceración dinámica (MD) y extracción asistida por ultrasonido (EAU). La cuantificación de los cannabinoides se realizó mediante cromatografía líquida de alta resolución con arreglo de diodos (CLAR-DAD). Para ello, se realizó un diseño factorial 2^3 con punto central y axiales (Factores: tiempo, relación muestra/solvente, concentración de etanol y método de extracción). Los resultados evidencian un porcentaje de CBDA entre 3,01 y 15,36 % por EAU y entre 2,42 y 14,41 % por MD. Se optimizó la respuesta para posteriores pruebas de actividad biológica, dando como mejores condiciones un tiempo de 10 minutos, relación muestra/solvente de 0,2 g/mL y concentración de etanol de 99,8 % por EAU. Para realizar actividad antioxidante por DPPH (2,2-difenil-1-picrilhidracilo) y ABTS (2,2'-azino-bis (3-etilbenzotiazolina-6-ácido sulfónico) se comparó el extracto óptimo obtenido por EAU, con un extracto realizado a las mismas condiciones por MD. También, se prepararon extractos con muestras descarboxiladas tanto por EAU como por MD a las mismas condiciones (10 min, 0,2 mg/mL y 99,8 % de etanol). Adicionalmente se comparó con extractos con concentraciones de etanol de 70 y 40 %. Por último, se realizó la prueba de inhibición de acetilcolinesterasa de extractos con concentraciones de etanol de 99,8 y 40 % por EAU. Se logra concluir que, por MD hay mayor inhibición de radicales ABTS y DPPH que por EAU, además, el extracto con concentración de etanol al 40 % presentó mayor inhibición del radical DPPH. Por otro lado, los extractos evaluados inhibieron a concentraciones hasta de 0,1 µg/mL la acetilcolinesterasa, resultados que probablemente no sólo se deban al contenido de cannabinoides si no de terpenoides, los cuales se cuantificaron.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Síntesis de un Nuevo Inhibidor no Nucleósido de la Transcriptasa Inversa (ITI-NN) para el Tratamiento de VIH-1 Diseñado a través de Acoplamiento Molecular y un Modelo QSAR

Tania C Camargo [a], Ophir S Montoya [b], Néstor A Mosos [c], James O Guevara *

[a] *INQA, Universidad El Bosque, Colombia*
[b] *INQA, Universidad El Bosque, Colombia*
[c] *INQA, Universidad El Bosque, Colombia*
** Autor de correspondencia: joguevara@unbosque.edu.co*

Palabras Claves: VIH, transcriptasa inversa, docking molecular, QSAR, síntesis orgánica.

El virus de inmunodeficiencia humana adquirida (VIH) es un retrovirus infeccioso capaz de deteriorar el sistema inmune del organismo, disminuir las defensas y llevar a un estado avanzado, denominado síndrome de inmunodeficiencia humana adquirida (SIDA). Esta enfermedad constituye un problema de salud pública a nivel mundial. Los inhibidores de la transcriptasa inversa no nucleósidos (ITI-NN) es una de la familia de fármacos empleada para combatir el VIH en la actualidad. Su actividad farmacológica consiste en inhibir alostéricamente la transcriptasa inversa (IT), enzima responsable de transformar el ARN vírico en ADN capaz de replicarse en la célula del huésped, disminuyendo la carga viral. No obstante, este grupo de moléculas presentan diversos efectos adversos, causantes de una pobre adherencia en ciertos pacientes. La baja adherencia al tratamiento puede generar mecanismos de resistencia de fármacos por parte del VIH, lo que conlleva a que se requiera un replanteamiento de la terapia, se generen más costos por parte del sistema de salud y, en casos extremos, se genere un avance en la enfermedad a estadíos potencialmente mortales. Por lo tanto, existe la necesidad de buscar un nuevo análogo a los ITI-NN que presente mejoras de afinidad molecular, en comparación a las moléculas ya existentes. Esto permitiría reducir regímenes de dosificación que permitan generar una menor cantidad de efectos adversos, que repercuta en una mejoría de la adherencia al tratamiento. El principal objetivo es diseñar a través de IA un nuevo análogo a los ITI-NN que posea dichas mejoras a través de selección de moléculas para realizar docking molecular y un modelo predictivo que permita obtener la estructura molecular de este nuevo análogo, sintetizarlo, caracterizarlo y evaluar su viabilidad celular. Las predicciones entre moléculas pueden afirmar la mejoría entre moléculas comerciales, iteraciones de nuevas estructuras y por último la molécula seleccionada a trabajar. Entre estas predicciones se encuentran factores importantes en la molécula como toxicidad, IC50, LogP y afinidad (Tabla No. 1).

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Tabla No. 1 Tabla comparativa entre moléculas modificadas a partir de cambios estructurales de los tres núcleos de fármacos comerciales selectos.

Mol	Afinidad promedio (kcal/mol)	IC_{50} predicho (µM)	Toxicidad				Log P
			Mutagénico	Carcino ratón	Carcino rata	Inhibición hERG	
Nevirapina	-9,5	0,32	SI	-	+	Medio	2.33
nevj3e1	-9,2	0,55	SI	-	-	Bajo	3.09
nevj3e2	-9,9	1,08	NO	-	-	Bajo	3.94
nevj3e3	-9,9	0,61	SI	-	-	Bajo	3.18
Doravirina	-10,2	0,95	NO	+	-	Medio	2.54
dor12	-11,1	1,46	SI	-	-	Medio	4,05
dor33	-10,4	0,21	NO	-	-	Medio	3,30
dor37	-10,2	0,17	NO	-	-	Medio	3,51
Rilpivirina	-10,0	0,24	NO	-	-	Medio	4,97
Ril010	-12,2	0,17	NO	+	+	Medio	5,03
Ril021	-11,8	2,30	SI	-	-	Medio	5,50
Ril013	-12,2	1,00	NO	+	+	Medio	5,03
Etravirina	-11,4	1,40	SI	-	-	Alto	5,62
Etr011	-10,9	19	NO	-	-	Ambiguo	4,89
Etr005	-11,7	1,40	SI	-	-	Medio	3.00

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA ORGÁNICA

I-161-O ***SÍNTESIS, SOLVATOFLUOROCROMISMO Y ACIDOCROMISMO DE NUEVOS DERIVADOS DE 5-(3-CUMARINIL)ISOXAZOLES***

Síntesis, Solvatofluorocromismo y Acidocromismo de Nuevos Derivados de 5-(3-cumarinil)isoxazoles

María C. Ríos [a,*], Néstor F. Bravo [b], Jaime A. Portilla.

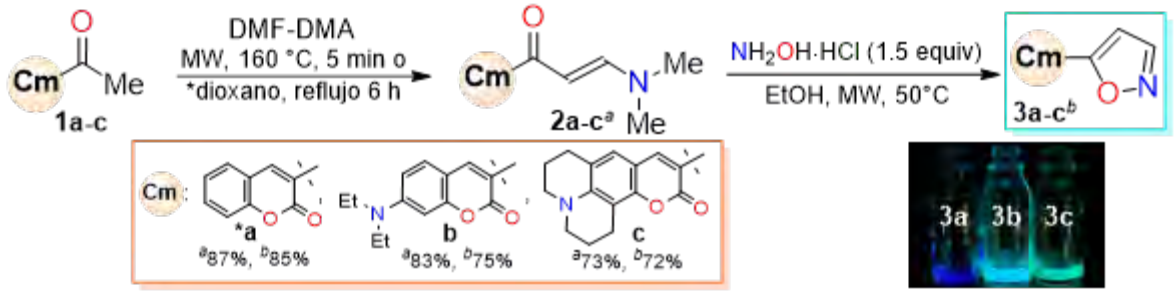
[a] *Grupo de Investigación en Compuestos Bio-orgánicos (GICOBIORG), Departamento de Química, Universidad de los Andes, Carrera 1 No. 18A-10, Bogotá 111711, Colombia.*

* *Autor de correspondencia: mc.rios@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: Isoxazoles; solvatofluorocromismo, acidocromismo; cumarinas.

Las cumarinas son conocidas por sus excepcionales propiedades ópticas y su conjugación con otros cromóforos potencia sus aplicaciones en los campos de detección, ciencia de materiales, etc.;[1] sobre todo utilizando síntesis modulables y sencillas. En este trabajo se muestran los resultados de la síntesis asistida por microondas y evaluación de las propiedades fotofísicas de 5-(3-cumarinil)isoxazoles **3a-c** dependientes de la cumarina de partida **1a-c** (Esquema 1).

Los nuevos compuestos híbridos **3a-c** exhibieron altos rendimientos tanto de reacción (70-83%) como cuánticos ($\varphi_F \geq 99\%$), excelente solvatofluorocromismo (en disolventes de diversa polaridad) y buen acidocromismo (titulaciones utilizando TFA). Los tres isoxazoles **3a-c** se caracterizaron mediante espectroscopía RMN (^{1}H, ^{13}C, ^{135}DEPT), espectrometría de masas de alta resolución (HRMS) y sus estructuras se confirmaron mediante difracción de rayos X de monocristal.



Esquema 1. Ruta sintética para la obtención de los derivados **3a-c**.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-163-O SÍNTESIS Y ACTIVIDAD INHIBIDORA SOBRE ENZIMAS COLINESTERASAS DE NUEVOS HÍBRIDOS MOLECULARES 4-FORMAMIDO TETRAHIDROQUINOLINAS ANCLADAS AL NÚCLEO HETEROCÍCLICO 1,2,3-TRIAZOL

Síntesis y Actividad Inhibidora sobre Enzimas Colinesterasas de Nuevos Híbridos Moleculares 4-Formamido Tetrahidroquinolinas Ancladas al Núcleo Heterocíclico 1,2,3-Triazol

Yuneidy Quintero[a*], Fausto A. Marín[a], Arnold R. Romero[a*], Margarita Gutiérrez[b]

[a] *Compuestos Orgánicos De Interés Medicinal (CODEIM), Parque tecnológico Guatiguará, Universidad Industrial de Santander, A.A. 678, Piedecuesta, Colombia*

[b] *Instituto de Química de Recursos Naturales (IQRN), Universidad de Talca, Av. Lircay s/n, Talca, Maule, Chile*

** Autor de correspondencia: yuneidy.quintero1@correo.uis.edu.co ,arafrom@uis.edu.co*

Palabras Claves: Tetrahidroquinolinas; triazol; reacción Povarov catiónica; híbridos moleculares; inhibición de colinesterasas.

Las tetrahidroquinolinas (THQs) y triazoles, son ejemplos de fragmentos heterocíclicos abundantes en la naturaleza, que han demostrado una notable actividad farmacológica, especialmente como agentes inhibidores de las enzimas acetilcolinesterasas (AChE) y butirilcolinesterasas (BChE). Teniendo en cuenta que la hipótesis colinérgica plantea que una de las principales causas de la enfermedad de Alzheimer (EA) está relacionada al decrecimiento alarmante de los niveles de la acetilcolina (ACh) en la sinapsis colinérgica, tanto las enzimas AChE, como las BChE se convierten en un blanco terapéutico atractivo para el tratamiento de la EA, ya que su inhibición ayuda a aumentar la actividad neuronal y a restaurar temporalmente los daños en la función cognitiva. Con base en lo anterior, y teniendo en cuenta que aún se hace necesario explorar nuevos compuestos capaces de inhibir dichas enzimas, mediante este estudio se obtuvo una nueva serie de 16 híbridos moleculares 4-formamido tetrahidroquinolina/1,2,3-triazol con rendimientos de entre 23-97 % (figura 1). Para acceder a estos dos importantes núcleos, se implementó la reacción de Povarov catiónica (adición tipo Mannich y cicloadición intramolecular Friedel-Crafts) para la síntesis de las la THQ y la reconocida reacción de cicloadición 1,3-dipolar tipo "click chemistry", para acceder al núcleo triazol. De los híbridos analizados mediante el ensayo de Ellman se destaca la serie con presencia del grupo metilo en el fragmento THQ, como inhibidores selectivos sobre la BChE, de la cual resalta el derivado 4-((4-(formamid-1-il)-6-metil-1,2,3,4-tetrahidroquinolina)metil)-1-(*p*-tolil)-1*H*-1,2,3-triazol (***5f***) por mostrar una marcada actividad como inhibidor dual, exhibiendo IC_{50}(AChE) = 3.15 ± 0.19 µM y IC_{50}(BChE) = 2.85 ± 0.083 µM. Estos resultados permiten proponer estos nuevos híbridos 4-formamido tetrahidroquinolina/1,2,3-triazol como posibles agentes anti-EA multifactorial.

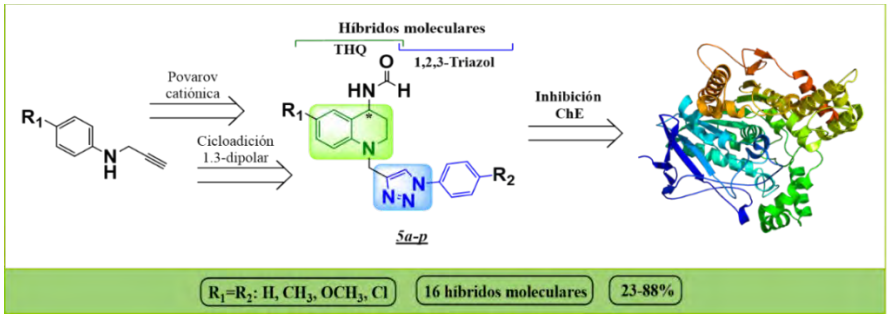


Figura 1. Síntesis de los nuevos híbridos moleculares 4-formamido tetrahidroquinolina/1,2,3-triazol.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Síntesis Mecanoquímica de Amidas y Péptidos

José G. Hernández*

Grupo de Investigación Ciencia de los Materiales (CIENMATE), Universidad de Antioquia, Colombia
** Autor de correspondencia: joseg.hernandez@udea.edu.co*

Palabras Claves: Amidas; mecanoquímica; molienda; péptidos

La formación de enlaces peptídicos y amida es fundamental en la síntesis química. Los compuestos basados en péptidos y amidas encuentran su aplicación en productos farmacéuticos, agroquímicos, polímeros, etc. Por ejemplo, alrededor del 25 % de los fármacos comercializados contienen un enlace amida.[1] Como resultado, la comunidad científica ha reconocido la necesidad de mejorar la sostenibilidad de los procesos químicos que conducen a las amidas. Tradicionalmente, la síntesis de amidas y péptidos involucra la amidación de ácidos carboxílicos y aminas usando reactivos de acoplamiento. Sin embargo, este enfoque presenta inconvenientes de sostenibilidad, como la gran cantidad de residuos producidos y una economía atómica deficiente. Como respuesta a este desafío, hemos venido desarrollando protocolos mecanoquímicos para la formación de precursores de aminoácidos, péptidos y amidas (Figura 1) en ausencia de disolventes, utilizando activadores abundantes o mediante la activación térmica y mecánica simultánea del sistema.[2a-c] En esta charla se presentará (i) la metodología para la síntesis mecanoquímica a través de molienda de bolas, (ii) se discutirá la síntesis de la moclobemida un medicamento tipo amida y (iii) se presentará la caracterización de intermediarios clave en la síntesis de amidas.

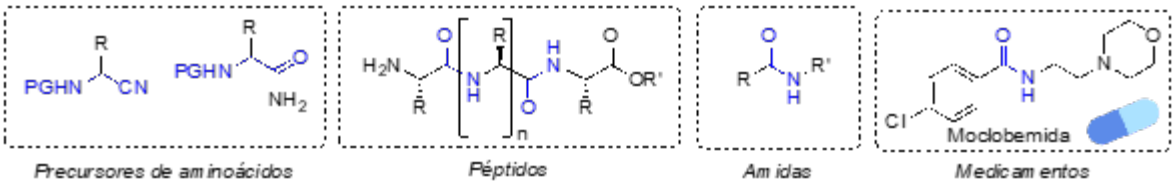


Figura 1. Precursores de aminoácidos, péptidos y amidas sintetizados mecanoquímicamente.

[1] H. Lundberg, F. Tinnis, N. Selander, H. Adolfsson, *Chem. Soc. Rev*. **2014**, *43*, 2714.
[2] (a) C. Bolm, R. Mocci, C. Schumacher, M. Turberg, F. Puccetti, José G. Hernández, *Angew. Chem. Int. Ed*. **2018**, *57*, 2423; (b) T. Stolar, S. Grubešić, N. Cindro, E. Meštrović, K. Užarević, J. G. Hernández, *Angew. Chem. Int. Ed*. **2021**, *60*, 12727; (c) T. Stolar, S. J. Alić, N. Cindro, K. Molčanov, K. Užarević, José G. Hernández, *ChemRxiv*. **2023**, 10.26434/chemrxiv-2023-2wnk9

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-165-O ***SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE UNA NUEVA SERIE DE HÍBRIDOS MOLECULARES (E)-3-ARIL-2-(4-ESTIRILQUINOLIN-2-IL)QUINAZOLIN-4(3H)-ONA***

Síntesis y caracterización de una nueva serie de híbridos moleculares (*E*)-3-aril-2-(4-estirilquinolin-2-il)quinazolin-4(3*H*)-ona

Diana M. Ardila[a], Juan G. Bernal[a], Diana R. Vera[a], Diego F. Rodríguez[a], Alirio Palma[a],* Justo Cobo.[b]

[a] Laboratorio de Síntesis Orgánica, Escuela de Química, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.
[b] Departamento de Química Inorgánica y Orgánica, Universidad de Jaén, España. e-mail: apalma@uis.edu.co

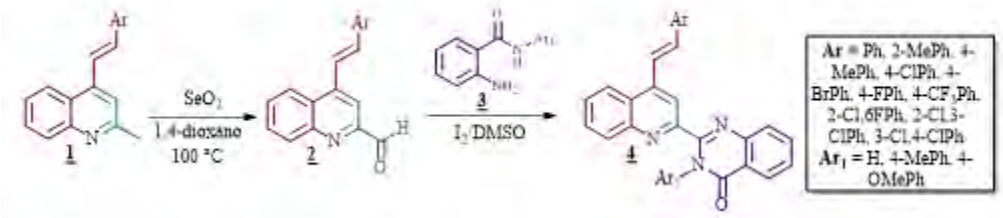
Palabras clave: Quinolinas, quinazolinonas, híbridos moleculares, ciclocondensación.

INTRODUCCIÓN

Los núcleos de la quinolina y la quinazolin-4-ona son estructuras privilegiadas que se emplean en el desarrollo de fármacos con diversos perfiles farmacológicos para tratamientos terapéuticos.[1–4] Teniendo en cuenta lo anterior, y guiados por los postulados de la hibridación molecular y, adicionalmente, con el propósito de ampliar los alcances sintéticos de la metodología de síntesis de 4-estirilquinolinas recientemente desarrollada en el LSO de la UIS,[5] en el presente trabajo se describe la implementación de una ruta de síntesis de dos pasos independientes para acceder a nuevos compuestos híbridos del tipo estirilquinolina-quinazolin-4-ona.

MÉTODOS Y RESULTADOS

La síntesis de los nuevos híbridos estirilquinolina-quinazolin-4-ona **4** se realizó por la ruta de dos pasos secuenciales representada en el ***Esquema 1***. En el primer paso, las 4-estirilquinolinas **1**, previamente preparadas mediante la reacción de Friedländer entre las 2´-aminochalconas y la acetona en ácido acético a 80 °C,[5] fueron transformadas en los correspondientes formil derivados **2** por oxidación del grupo metilo con SeO_2 en 1,4-dioxano a 100 °C.[6]En el segundo paso, se llevó a cabo la reacción de condensación-ciclación intramolecular oxidativa de los formil derivados **2** con las 2-amino-*N*-arilbenzamidas **3** en DMSO y yodo molecular, y aire como fuente de oxígeno, lo que resultó en la formación efectivas de los híbridos moleculares de interés **4**. Empleando esta metodología, se prepararon 25 híbridos, para los cuales, por primera vez, se reportan sus propiedades espectroscópicas y fisicoquímicas.



Esquema 1. *Síntesis de los nuevos híbridos (E)-3-aril-2-(4-estirilquinolin-2-il)quinazolin-4(3H)-onas* ***4****.*

CONCLUSIÓN

La metodología de síntesis descrita representa una excelente alternativa para llevar a cabo la creación de una librería química representativa de nuevos híbridos moleculares del tipo estirilquinolina-quinazolin-4-ona a partir de 4-estiril-2-metil-quinolinas, precursores muy accesibles por su fácil preparación vía la reacción de Frieldänder.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

REFERENCIAS

1. Jain, S. *et al. Arab. J. Chem.*, **12**, 4920–4946 (2019).
2. Yadav, P. & Shah, K. *Bioorg Chem.*, **109**, 104639 (2021).
3. Wang, D. & Gao, F. *Chem Cent J.*, **7**, 1–15 (2013).
4. Selvam, T. P. & Kumar, P. V. *Res. Pharm.*, **1**, 1–21 (2011).
5. Palma, A. Meléndez, A. *et al. Synthesis.*,**52**, 1804-1822 (2020).
6. Wang, L. *et al. Bioorg Med Chem* **23**, 4364–4374 (2015).

AGRADECIMIENTOS

Agradecimientos a la Vicerrectoría de Investigación y Extensión (VIE) proyecto 3918.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Síntesis multicomponente de 3-ciano-2(1*H*)-piridonas: Análisis espectroscópico, cristalográfico y evaluación de la actividad antitumoral

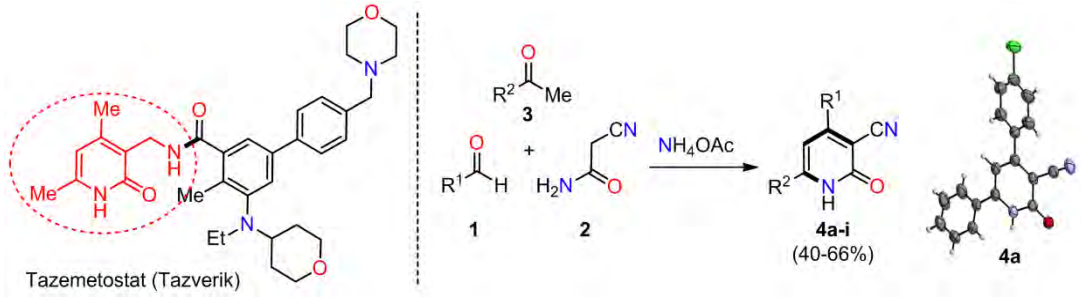
Diana C. Hurtado [a], Hugo A. Rojas [a], Jaime A. Portilla [b], Mario A. Macías [c], Diana K. Becerra [a,*] y Juan C. Castillo [a,*]

[a] *Grupo de Catálisis de la UPTC, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Colombia*
[b] *Grupo de Investigación en Compuestos Bio-orgánicos, Universidad de los Andes, Colombia*
[c] *Grupo de Cristalografía y Química de Materiales, Universidad de los Andes, Colombia*

** Autores de correspondencia: diana.becerra@08uptc.edu.co, juan.castillo06@uptc.edu.co*

Palabras Claves: 2(1*H*)-Piridona; Reacción multicomponente; Cristalografía; Actividad antitumoral

El Tazemetostat se emplea para tratar el sarcoma epitelioide metastásico, actuando como un inhibidor competitivo de la enzima histona-lisina metil transferasa EZH2 (Enhancer of Zeste Homolog 2) [1,2]. En este contexto, es crucial investigar la síntesis de 3-cianopiridin-2(1*H*)-onas **4**, ya que al reducir selectivamente el grupo funcional nitrilo, se obtienen 3-(aminometil)piridin-2(1*H*)-onas, un fragmento análogo al farmacóforo presente en Tazemetostat (Esquema 1). Para lograrlo, se efectuó la síntesis de 3-ciano-2(1*H*)-piridonas **4** mediante una reacción multicomponente entre aldehídos (hetero)aromáticos **1**, 2-cianoacetamida **2**, acetofenonas sustituidas **3** y acetato de amonio en ausencia de disolvente (Esquema 1). Los compuestos obtenidos se caracterizaron mediante espectroscopía de IR, UV–Vis y RMN, espectrometría de masas, análisis termogravimétrico y calorimetría diferencial de barrido. Específicamente, los espectros UV–Vis revelaron un desplazamiento batocrómico de la banda de absorción n□π* a medida que aumentaba la polaridad del disolvente (EtOH, CH_3CN y DMSO). El análisis de difracción de rayos–X de monocristal confirmó que el tautómero predominante es la 3-ciano-2(1*H*)-piridona **4a**. En resumen, el protocolo sintético se destaca por la formación de tres enlaces en un solo paso de reacción, su simplicidad operacional, la ausencia de disolvente y los rendimientos aceptables (40–66%).



Esquema 1. Síntesis multicomponente de 3-ciano-2(1*H*)-piridonas **4** en ausencia de disolvente. Final del formulario

El National Cancer Institute (NCI, EEUU) seleccionó todos los productos sintetizados para la evaluación de la actividad antitumoral *in vitro* frente a 60 líneas celulares a una dosis única de 10 μM. En particular, la 3-ciano-2(1*H*)-piridona **4c** (R^1 = 4-Metoxifenil y R^2 = 3,4,5-Trimetoxifenil) mostró una importante actividad citostática frente a las líneas

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

celulares tumorales humanas NCI-H322M (Cáncer de pulmón de células no pequeñas) y MDA-MB-231/ATCC (Cáncer de mama) con un porcentaje de inhibición del crecimiento del 94.2% y 98.3%, respectivamente. Estos resultados condujeron a que el NCI seleccionara el compuesto **4c** para un ensayo a cinco concentraciones diferentes (0.01, 0.1, 1.0, 10.0 y 100.0 μM), obteniéndose valores de GI_{50} en un rango de 1.97–9.76 μM frente a 20 líneas celulares tumorales humanas.

[1] Kuntz, K.W., Campbell, J.E., Keilhack, H., et al. *J. Med. Chem.* **2016**, *59*, 1556–1564.
[2] Hurtado, D., Salinas, A., Rojas, H., Becerra, D., Castillo, J.-C. *RSC Adv.* **2022**, *12*, 35158–35176.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-167-O ***RETOS Y PERSPECTIVAS PARA LA SÍNTESIS DE NUEVAS MOLÉCULAS CON APLICACIÓN EN LA FABRICACIÓN DE DISPOSITIVOS FOTOVOLTAICOS***

Retos y perspectivas para la síntesis de nuevas moléculas con aplicación en la fabricación de dispositivos fotovoltaicos

Carlos E. Puerto Galvis

[a] *Institute of Chemical Research of Catalonia (ICIQ), Avda. Països Catalans, 16, 43007 Tarragona, España*

* *Autor de correspondencia:* *cpuerto@iciq.es*

Palabras Claves: Química orgánica; Celdas solares; Materiales transportadores de huecos y electrones; Acoplamiento N-N y C-C; ligandos orgánicos de perovskita.

Pequeñas moléculas orgánicas han sido comúnmente utilizadas en la fabricación de celdas solares de perovskita (PSC) y sensibilizadas por colorantes (DSSCs), constituyéndose como una alternativa interésate a los componentes inorgánicos hacia la búsqueda de dispositivos fotovoltaicos más eficientes, económicos, de fácil fabricación y con bajo impacto ambiental.[1] Dentro de este campo, son varios los tipos de moléculas que se necesitan, y cada una de ellas con unos requerimientos estructurales especiales que hacen que muchos de los aspectos modernos de la química orgánica se necesiten y se apliquen para el estudio de dispositivos que permitan la conversión eficiente de energía solar en energía eléctrica.[2]

Debido a la importancia de la química orgánica en el diseño y síntesis de nuevas moléculas con aplicación en la fabricación de dispositivos fotovoltaicos, en esta presentación se discutirán los retos actuales a los que se enfrenta esta disciplina para contribuir al desarrollo de celdas solares más estables y eficientes, incluyendo una perspectiva que promueva la aplicación de metodologías y protocolos, más allá de las condiciones de reacción convencionales, para que los procesos sintéticos resulten más amigables con el medio ambiente, sean más eficientes en cuanto a los rendimientos globales y permitan poder ser llevados a cabo a escala industrial (Figura 1).[3]

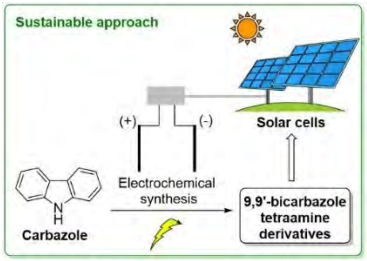


Figura 1. Células solares fabricadas con materiales transportadores de huecos preparados mediante electrosíntesis.

Referencias

1. *ACS Energy Lett*., **2019**, *4*, 2537–2539.
2. *Mater. Horiz.*, **2020**, *7*, 2276-2291.
3. *ACS Appl. Energy Mater.*, **2023**, *6*, 1239-1247

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-190-O ***DESPROTECCIÓN SELECTIVA DE AMINAS PRIMARIAS AROMÁTICAS, USANDO LA REACCIÓN DE TRANSAMIDACIÓN Y FUENTES SÓLIDAS DE AMONIACO***

Desprotección Selectiva de Aminas Primarias Aromáticas, Usando la Reacción de Transamidación Y Fuentes Sólidas de amoniaco.

Julia M Urbiña [a], John A Corredor [a], Diego Gamba Sánchez [a]*

[a] *Laboratorio de Síntesis Orgánica Bio y organocatálisis, Universidad de los Andes, Colombia*

* *Autor de correspondencia: da.gamba1361@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: Aminas; transamidación; desprotección; ftalimidas.

El uso de sustratos que contienen en su estructura aminas primarias como precursores e intermediarios de reacciones es reportado en diferentes metodologías sintéticas, en las cuales, también es común el uso de grupos protectores con el fin de limitar la reactividad de dichas aminas.[1] De los diferentes grupos protectores disponibles para aminas primarias, las ftalimidas presentan grandes ventajas puesto que permiten llevar a cabo protecciones en una sola etapa y son estables en diferentes condiciones.[2] Las desventajas de las mismas radican en el proceso de desprotección, ya que es necesario usar condiciones de hidrólisis fuertemente básicas o ácidas con el fin de liberar la amina primaria.[2,3]. Algunas alternativas como el uso de agentes reductores[4] o métodos enzimáticos,[5] son opciones que requieren condiciones menos drásticas, sin embargo, son métodos con alcance limitado[6] y por lo tanto, no permiten establecer una metodología general para la desprotección de ftalimidas.

En este trabajo se presenta una nueva metodología sintética que permite la desprotección de aminas primarias aromáticas a través de la reacción de transamidación con fuentes sólidas de amoniaco (Figura 1), reacción que a su vez permite recuperar el grupo protector. Esta metodología ha sido evaluada en diferentes sustratos encontrando un amplio alcance de la reacción.

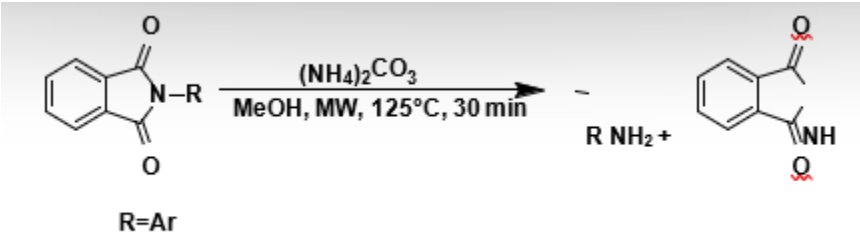


Figura 1. Reacción de transamidación con fuentes sólidas de amoniaco

[1] Lawrence, S. A. *Amines. Synthesis, Properties, and Applications*; Cambridge University Press: Cambridge, **2004** 2 Dhillon, S. Drugs. **2010**, 70, 489-512
[2] Barton, J. W. Protection of N—H Bonds and NR 3. En: Protective Groups in Organic Chemistry, Springer, **1973**
[3] Ragnarsson, U.; Grehn, L. *Acc. Chem. Res.* **1991**, *24*, 285-289
[4] Osby, J. O.; Martin, M. G.; Ganem, B. *Tetrahedron Lett.* **1984**, *25*, 2093-2096
[5] Costello, C. A.; Kreuzman, A. J.; Zmijewski, M. J. *Tetrahedron Lett.* **1996**, *37*, 7469-7472
[6] Das, U. K.; Janes, T.; Kumar, A.; Milstein, D. *Green Chem.* **2020**, *22*, 3079-3082

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-275-O SÍNTESIS DE AMIDAS CON POTENCIAL ACTIVIDAD ANTITUMORAL MEDIANTE LA AMIDACIÓN DIRECTA VÍA CATÁLISIS HETEROGÉNEA

Síntesis de amidas con potencial actividad antitumoral mediante la amidación directa vía catálisis heterogénea

Angélica A. Salinas [a], Hugo A. Rojas [a], Jaime A. Portilla [b], José J. Martínez [a], Diana K. Becerra [a,*] y Juan C. Castillo [a,*]

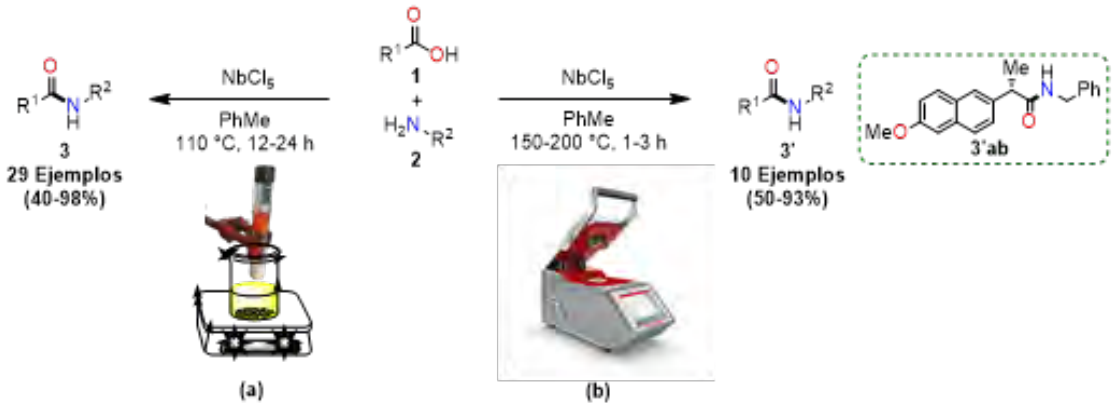
[a] *Grupo de Catálisis de la UPTC, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Colombia*
[b] *Grupo de Investigación en Compuestos Bio-orgánicos, Universidad de los Andes, Colombia*

* *Autores de correspondencia: diana.becerra08@uptc.edu.co, juan.castillo06@uptc.edu.co*

Palabras Claves: Amidación directa; amidas secundarias; catálisis heterogénea; actividad antitumoral

La síntesis de amidas es de gran importancia en la industria farmacéutica, ya que aproximadamente el 30% de los ingredientes farmacéuticos activos incorporan la funcionalidad amida en su estructura [1,2]. A pesar de la diversidad de materiales de partida y protocolos sintéticos disponibles para formar el enlace peptídico, son escasos aquellos que puedan considerarse como protocolos ideales porque la mayoría de estos métodos requieren condiciones anhidras, la utilización de una atmósfera inerte y generalmente involucran catálisis homogénea, lo cual dificulta la recuperación del catalizador [1,2]. Para abordar este desafío, se efectuó la síntesis de amidas secundarias **3** y **3'** mediante una reacción de amidación directa entre ácidos carboxílicos no activados **1** y aminas primarias alifáticas y (hetero)aromáticas **2** empleando $NbCl_5$ como catalizador y tolueno como disolvente. Se aplicaron dos estrategias sintéticas distintas: (a) calentamiento convencional en baño de aceite a una temperatura de 110 °C entre 12 y 24 horas, y (b) utilización del reactor Monowave 50 con temperaturas entre 150 y 200 °C durante un período de 1 a 3 horas (Esquema 1). Es importante destacar que en este estudio se emplearon ácidos carboxílicos no activados, como la vitamina B3 e ingredientes activos farmacéuticos aislados de medicamentos caducados, tales como Naproxeno, Ibuprofeno y Ciprofibrato. Con el propósito de comprender el rol catalítico del $NbCl_5$ en la reacción de amidación directa, se realizó su caracterización físico-química mediante técnicas como TGA, DRIFTS con piridina, fisisorción de N_2 y desorción a temperatura programada de NH_3. Los resultados sugieren la presencia de una acidez de intensidad intermedia en la superficie del catalizador, predominando en su mayoría la naturaleza de tipo Lewis. En resumen, los protocolos sintéticos se destacan por el uso de cantidades estequiométricas de los materiales de partida, una carga catalítica baja, la ausencia de condiciones anhidras, una sencillez operacional y rendimientos satisfactorios en los protocolos (a) y (b) con porcentajes en el rango de 40–98% y 50–93%, respectivamente.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.



Esquema 1. Amidación directa mediante (a) calentamiento convencional en baño de aceite y (b) el reactor Monowave 50.

Finalmente, se realizaron estudios de actividad antitumoral *in vitro* en el National Cancer Institute (NCI, EEUU) utilizando un total de 31 de las 39 amidas que fueron sintetizadas. Entre ellas, la amida **3'ab** mostró una importante actividad frente a 56 de las 60 líneas celulares tumorales humanas evaluadas. Los resultados revelaron valores de GI_{50} en el rango de 1.68–7.94 μM y valores de LC_{50} entre 98.7 y >100.0 μM.

[1] Valeur, E.; Bradley, M. *Chem. Soc. Rev.* **2009**, 38, 606–631.
[2] Sabatini, M.T.; Boulton, L.T.; Sneddon, H.F.; Sheppard, T.D. *Nat. Catal.* **2019**, *2*, 10–17.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-339-O ***OXIDACIÓN CON PERMANGANATO DE POTASIO Y CATALIZADOR DE JACOBSEN DE Δ5-ESTEROLES: COLESTEROL Y ESTIGMASTEROL 3-ACETILADOS.***

Oxidación con Permanganato de Potasio y Catalizador de Jacobsen de Δ⁵-esteroles: Colesterol y Estigmasterol 3-acetilados.

Hernán G, Astudillo [a*], Luis A, Lenis [b], Luis J, Espinoza [c]

[a] *Grupo de Investigación en Procesos Electroquímicos, Universidad del Cauca, Colombia*
[b] *Química de Productos Naturales, Universidad del Cauca, Colombia*
[c] *Química de Productos Naturales, Universidad del Cauca, Colombia*
* *Autor de correspondencia:* hernanastudillo@unicauca.edu.co

Palabras Claves: *Epoxidación*; Δ⁵-Esteroles; Fitosteroides

Los Δ⁵-esteroles colesterol y estigmasterol son estructuras derivadas de ciclopentanoperhidrofenantreno útiles para la síntesis de esteroides mediante la oxidación alílica o directa de forma regioselectiva sobre su doble enlace en el Anillo B. De esta manera es posible obtener moléculas con actividad brasinoesteroidal en plantas; derivados mediante aminación reductiva que desencadenan apoptosis en algunas líneas celulares de cáncer en mamíferos y con actividad hipoglicemiante por conjugación con monosacáridos especialmente en el Anillo A, de las cuales algunas también están presentes en productos naturales como las charantinas.

El objetivo de este trabajo consistió en comparar los productos de oxidación, la regioselectividad y quimioselectividad de los esteroles colesterol y estigmasterol acetilados, usando como oxidantes el catalizador de Jacobsen con hipoclorito de sodio, y Permanganato de potasio en fase heterogénea.

Se realizó seguimiento de las reacciones por TLC, purificación en columna y análisis de las muestras mediante FT-IR (Espectrofotómetro IR Thermo, Nicolet™ iS™) y experimentos RMN ^{1}H y ^{13}C mono y bidimensionales (Espectrómetro Bruker Avance 400 Digital, 400.1 MHz). Los resultados muestran que el catalizador y el permanganato conllevan principalmente a la formación de epóxidos, que son visibles a 870 cm^{-1} en FTIR, y a 3.07 ppm y 2.89 ppm en ^{1}H-RMN. La configuración del epóxido ha sido asignada como beta y alfa respectivamente, mediante experimentos NOESY ya reportados en la literatura. Se observaron otros productos de oxidación alílica y sobre el diol generado por apertura del epóxido. El grado de conversión del permanganato es cercano al 95% con proporción de epóxidos beta-alfa 93:7 para el acetato de 3-estigmasterilo, un resultado similar se obtiene para el acetato de 3-colesterilo. Por su parte, el catalizador de Jacobsen genera conversiones bajas, menores al 15% aun en condiciones optimizadas. Se comparó con *m*-CPBA, y la conversión fue similar a la del permanganato, pero la configuración del epóxido es mayoritariamente alfa, en una relación beta-alfa 17-83.

Se concluye que la oxidación de Δ⁵-esteroles mediante permanganato de potasio en fase heterogénea es la mejor metodología para la obtención regio- y diastereoselectiva de beta-epóxidos, con amplísimas aplicaciones en metodologías de síntesis de derivados de esteroles oxigenados en el anillo B.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Aminación Reductiva Indirecta de Aldehídos Aromáticos con Hidróxido de Amonio

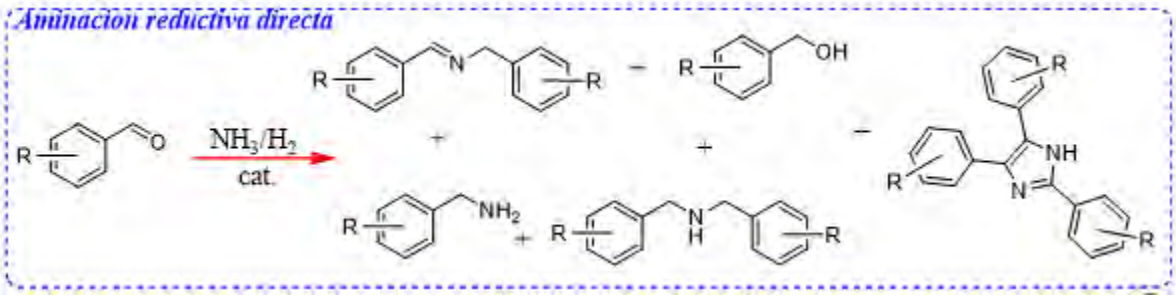
Andres F. Gonzalez [a]*, **Rodolfo Quevedo** [b]

[a b] *Universidad Nacional de Colombia*

* Autor de correspondencia: anfgonzalezon@unal.edu.co

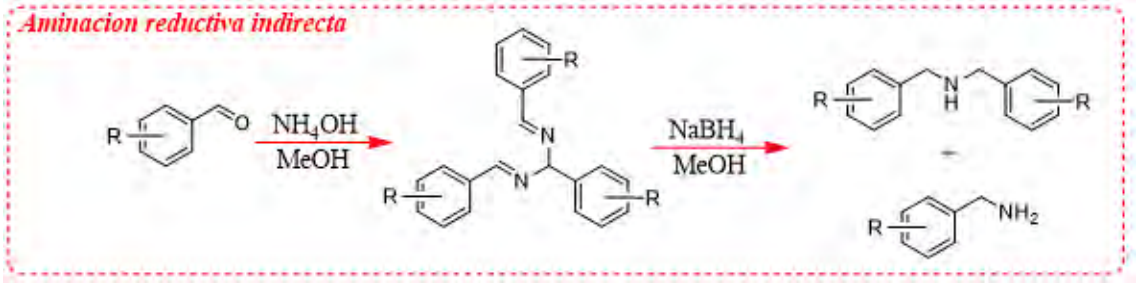
Palabras clave: Hidrobenzamida, Aldehído aromático, Hidróxido de amonio

Las bencilaminas están presentes en diversos compuestos con actividad biológica. Un método general de síntesis es la aminación reductiva directa, procedimiento que requiere catalizadores metálicos y que usualmente produce mezclas de productos de reacción. (Esquema 1).



Esquema 1: Productos de aminación reductiva directa

En este trabajo se estudió la aminación reductiva indirecta de aldehídos aromáticos con hidróxido de amonio, como un método accesible para la síntesis de bencilaminas. Los resultados permitieron establecer que la condensación de aldehídos aromáticos con hidróxido de amonio produce compuestos conocidos como hidrobenzamidas, y que su reacción con borohidruro produce mezclas equimolares de bencilaminas primarias y secundarias (Esquema 2). En este trabajo se analiza este comportamiento y se propone un posible mecanismo de reacción.



Esquema 2: Aminación reductiva indirecta de aldehídos aromáticos con hidróxido de amonio.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-430-O ***SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE DERIVADOS PIRAZÓLICOS DE IMINAS, COORDINACIÓN A PALADIO, Y EVALUACIÓN CATALÍTICA EN REACCIONES DE ACOPLAMIENTO C-C TIPO MIZOROKI-HECK EN MEDIO ACUOSO.***

Síntesis Y Caracterización De Derivados Pirazólicos De Iminas, Coordinación A Paladio, Y Evaluación Catalítica En Reacciones De Acoplamiento C-C Tipo Mizoroki-Heck En Medio Acuoso.

Alfonso Amortegui Clavijo[a],*, **Fernando Cuenú**[a]

[a] *Grupo de investigación en compuestos organometálicos y catálisis, Universidad del Quindío, Colombia.*

* Alfonso Amortegui Clavijo: aamorteguic@uqvirtual.edu.co

Palabras Claves: Síntesis; cinética; Paladio; Catálisis; Heck.

Se logro sintetizar nuevos derivados de pirazol funcionalizados en iminas para su coordinación a paladio y su posterior evaluación en reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck en medio acuoso.

Con la implementación de solventes ambientalmente seguros se realizo la síntesis de los ligandos, la cual consistió en agitación en etanol a temperatura ambiente, y se logró la modificación a las condiciones estándares de la reacción de acoplamiento C-C, ya que se realizó en DMF y DMF/H_2O relación (1:1) permitiendo reducir el uso de solventes tóxicos. Todas las moléculas fueron caracterizadas por técnicas espectroscopias, la figura 1 se muestra el espectro infrarrojo experimental y teórico del ligando C(4) y la figura 2 muestra el espectro infrarrojo del complejo Pd(4).

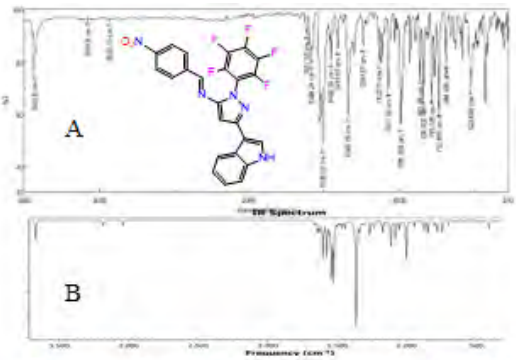


Figura 2. A) Espectro infrarrojo experimental y teórico del ligando C(4).

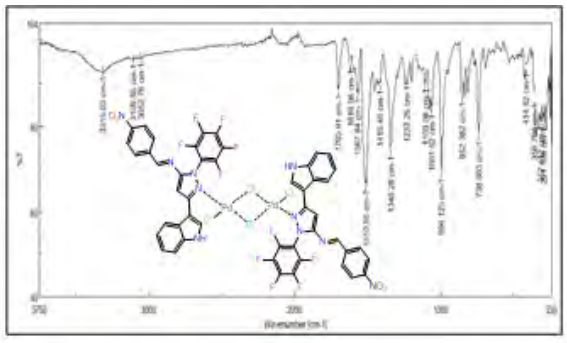


Figura 1. Espectro infrarrojo del complejo Pd(4)

Se evaluó la capacidad catalítica de los tres complejos en condiciones estándares y haciendo variaciones en temperatura (ver tabla 1), solvente y sustrato (ver tabla 2). Se lograron calcular las constantes de formación mediante cinética química tanto del producto *trans*-estirilaldehido y el 1,1difenileteno (ver tabla 3).

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Tabla 1. Reacción de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck entre 4-Bromobenzaldehido y estireno en DMF con variación de la temperatura.

DMF			
Temperatura	Catalizador	Tiempo de reacción	Selectividad
130	Pd(2)	2	60
	Pd(3)	2	95
	Pd(4)	2	100
125	Pd(2)	3	73
	Pd(3)	3	98
	Pd(4)	3	100
110	Pd(2)	6	80
	Pd(3)	6	100
	Pd(4)	6	100
100	Pd(2)	8	82
	Pd(3)	8	100
	Pd(4)	8	100

Tabla 2. Reacción de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck entre el ácido 4-Bromobenzoico y estireno en DMF con variación de la temperatura.

DMF			
Temperatura	Catalizador	Tiempo de reacción	Rendimiento
125	Pd(2)	3	73
	Pd(3)	3	98
	Pd(4)	3	100
DMF/H2O			
Temperatura	Catalizador	Tiempo de reacción	Rendimiento
125	Pd(2)	3	10
	Pd(3)	3	90
	Pd(4)	3	95

Tabla 3. Cinética de la reacción de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck entre 4-bromobenzaldehido y estireno en DMF.

DMF

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Temperatura	Catalizador	Tiempo de reacción	Const. De formación (mol^{-1} *min^{-1})
125	Pd(2)	1	0,184 – 2,3
	Pd(3)	1	3,34
	Pd(4)	1	4,44

Permitiendo concluir que los ligandos tipo imina derivados de pirazol generan un efecto importante como ligandos de coordinación en complejos de paladio durante las reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck, además que la posición de los sustituyentes en el ligando permite optimizar las condiciones de reacción y favorecer la regioselectivivdad de la reacción.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Química y Propiedades de Pirazolo[1,5-*a*]pirimidinas: Un Enfoque Actual

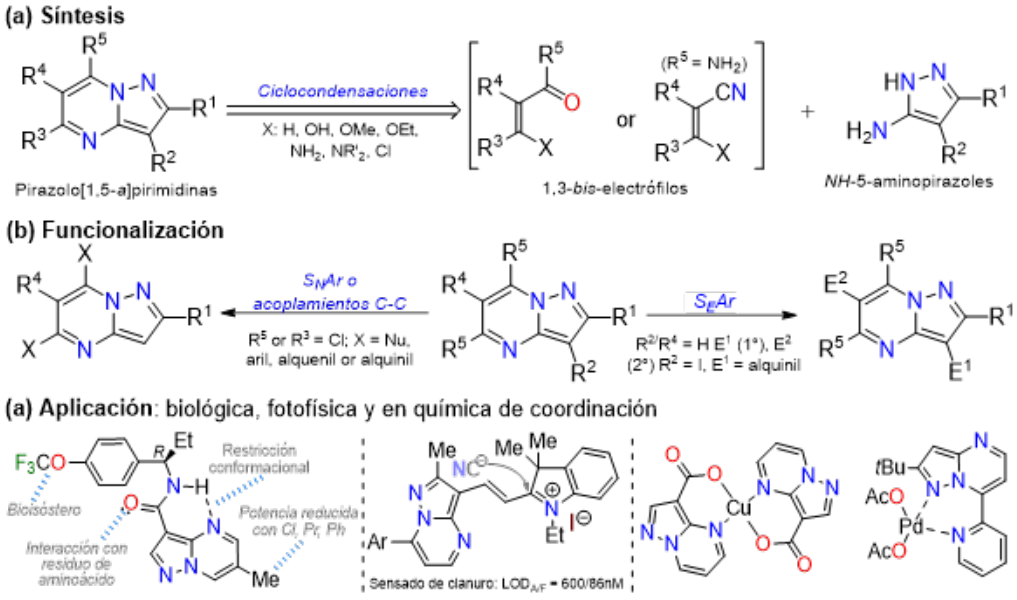
Jaime Portilla [a]

[a] *Grupo de Investigación en Compuestos Bio-orgánicos (GICOBIORG), Departamento de Química, Universidad de los Andes, Carrera 1 No. 18A-10, Bogotá 111711, Colombia.*

* *Autor de correspondencia: jportill@uniandes.edu.co*

Palabras Clave: aplicaciones; pirazolo[1,5-*a*]pirimidina; propiedades; reactividad; síntesis.

Las pirazolo[1,5-*a*]pirimidinas (PPs) son una familia importante y estratégica de compuestos N-heterocíclicos dada su aplicabilidad y versatilidad sintética en la preparación de productos químicos relevantes en el campo biológico, farmacéutico, fotofísico, ciencia de materiales e industrial; por lo que las transformaciones sintéticas que implican PPs son interés y varios grupos de investigación, que centran sus trabajos en la búsqueda productos con diversa sustitución para descubrir nuevas y/o mejores aplicaciones (Esquema 1). Por lo tanto, vale la pena estudiar la química y propiedades de las PPs para comprender su comportamiento desde las (i) propiedades fundamentales, pasando por los (ii) detalles sintéticos y de (iii) reactividad, hasta las (iv) aplicaciones de esta familia de compuestos. Debido a nuestro continuo interés en este campo, por invitación, escribimos un capítulo de libro sobre los recientes avances en la química de las PPs para 'Advances in Heterocyclic Chemistry – vol. 142 (2024), ELSEVIER'. Por lo tanto, sería placentero mostrar un panorama global del trabajo ya aceptado.



Esquema 1. a) Síntesis, b) funcionalización y aplicaciones generales de pirazolo[1,5-*a*]pirimidinas.

I-463-O ACTIVACIÓN DE SULFOXIDOS CON CLORURO DE OXALILO Y HALOGENACIÓN CATALÍTICA DE AROMÁTICOS

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Activación de Sulfoxidos con Cloruro de Oxalilo y Halogenación Catalítica de Aromáticos

Diego Gamba Sánchez*

Laboratory of Organic Synthesis, Bio and Organocatalysis, Chemistry Department, Universidad de Los Andes, Cra 1 No. 18A-12; Q:305, Bogotá 111711, Colombia

*da.gamba1361@uniandes.edu.co

Palabras clave: sulfóxidos; organocatálisis; clorosulfonio; aromáticos

La activación de sulfóxidos con cloruro de oxalilo produce sales de clorosulfonio, especies caracterizadas por tener cuatro grupos electrofilicos. En principio, es posible hacer reaccionar los hidrógenos alpha al azufre generando iones tionio que pueden posteriormente reaccionar con nucleófilos de carbono u oxigenados generando cromanos y oxazolinas respectivamente. Adicionalmente es posible atrapar el cloro electrofílico con nucleófilos como aromáticos o enolatos ya sea para producir cetonas alpha cloradas, cloración de anillos aromáticos ricos en electrones o si se usa una especie de sacrificio se puede tener un método potente y simple de reducción de sulfóxidos.

En esta presentación se hará un resumen de la investigación realizada en el Laboratorio de Síntesis Orgánica, Bio- y Organocatálisis en los últimos 8 años y que incluyen un método simple para obtener oxazolinas y oxazoles a partir de amidas,[4] un proceso tándem Pummerer-Friedel Craft,[3] algunos métodos de reducción de sulfóxidos[2] y un método catalítico de cloración de arenos y heteroarenos ricos en electrones donde por primera vez se usó un sulfóxido como catalizador orgánico.[1]

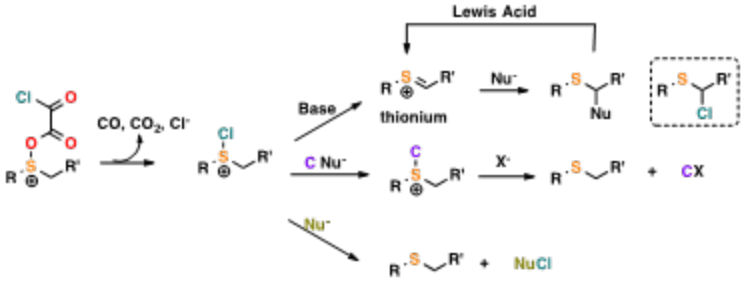


Figura 1. Reactividad de sales de clorosulfonio generadas desde sulfoxidos

Referencias:

1. Highly Selective Organocatalyzed Chlorination of (Hetero)Arenes with Electrophilic Chlorosulfoniums. A. Garay-Talero, P. Acosta-Guzmán and D. Gamba-Sánchez* *Adv. Synth. Catal.* **2023**, Submitted
2. Electrophilic Chlorine from Chlorosulfonium Salts: A Highly Chemoselective Reduction of Sulfoxides. P. Acosta-Guzmán, C. Mahecha-Mahecha and D. Gamba-Sánchez* *Chem. Eur. J.* **2020**, 26, 10348-10354., DOI: 10.1002/chem.202001815. Hot paper
3. Pummerer Synthesis of Chromanes Reveals a Competition between Cyclization and Reductive Chlorination. P. Acosta-Guzmán, A. Rodríguez-López, and D. Gamba-Sánchez* *Org. Lett*. **2019**, *21*, 6903-6908., DOI: 10.1021/acs.orglett.9b02520
4. Insights into the Pummerer Synthesis of Oxaxolines. L. Becerra-Cely, J. Rueda-Espinosa, A. Ojeda-Porras and D. Gamba-Sánchez* *Org. Biomol. Chem.* **2016**, *14*, 8474-8485., DOI: 10.1039/c6ob01666a

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-464-O SÍNTESIS Y ELUCIDACIÓN ESTRUCTURAL DE NUEVOS DERIVADOS 5-O-AMINOALQUIL-2-ARIL-3-METILBENZO[B]FURÁNICOS CON UNA PROMISORIA ACTIVIDAD ANTITUMORAL

Síntesis y Elucidación Estructural de Nuevos Derivados 5-*O*-aminoalquil-2-aril-3-metilbenzo[*b*]furánicos con una Promisoria Actividad Antitumoral

Daniel F. Alvarez.[a*], **Cristian C. Bernal C.**[a], **Arnold R. Romero**[a*]

[a] *Compuestos Orgánicos De Interés Medicinal (CODEIM), Parque tecnológico Guatiguará, Universidad Industrial de Santander, A.A. 678, Piedecuesta, Colombia*

* *Autor de correspondencia: **aniversal12**@hotrmail.com, **arafrom**@uis.edu.co*

Palabras Claves: Dihidrobenzo[*b*]furanos; reacción de cicloadición formal [3+2]; inhibición Topoisomerasa I; estudio *in-silico*; actividad anticancerígena.

Los benzo[*b*]furanos, tal como su nombre lo implica, contienen dos anillos fusionados, uno bencénico y uno furánico. Este tipo de compuestos han exhibido bioactividades novedosas en el campo medicinal, a tal punto que se ha venido incentivando el desarrollo de nuevas estructuras moleculares con características potenciadas. Dentro de los métodos sintéticos reportados, la reacción de cicloadición formal [3+2] es una de las herramientas que facilitan el acceso al anillo dihibrobenzo[*b*]furánico, el cual, posterior a una aromatización oxidativa se permite un acceso fácil y eficiente a su análogo benzo[*b*]furánico. Asimismo, cadenas de aminoalquilo que acompañan a distintos compuestos orgánicos han demostrado propiedades bioactivas resaltables en enfermedades como el Alzheimer o cáncer.

En el presente estudio se sintetizó una gama de compuestos benzo[*b*]furánicos-*O*-funcionalizados (**Figura 1**), Los 5-*O*-aminoal-2-aril-3-metilbenzo[*b*]furanos (***5a-f*** y ***6a-e***) fueron obtenidos de una ruta sintética que se compone de 3 etapas. Como primera medida, se empleó la reacción de cicloadición formal [3+2] interaccionando *p*-benzoquinonas (***1a-c***) y derivados estirénicos (***2a-d***) catalizada por un ácido de Lewis obteniendo los correspondientes núcleos dihibrobenzo[*b*]furánicos (***3a-f***). Los compuestos 2,3-dihidrobenzo[*b*]furánicos fueron posteriormente aromatizados bajo condiciones de alta temperatura con azufre elemental obteniendo una gama de benzo[*b*]furanos (***4a-f***). En la última etapa de la ruta sintética se hizo uso de las propiedades ácidas de los fenoles, llevando a cabo la reacción de Williamson; en la que bajo condiciones básicas se producen 5-*O*-aminoalquil-2-aril-3-metilbenzo[*b*]furanos interaccionando los benzo[*b*]furanos (***4a-f***) con dos cloruros de aminoalquilo. Se obtuvo una nueva gama de compuestos sintetizados con rendimientos óptimos y una promisoria actividad anticancérigena (inhibición de Topo I) debido a la afinidad existente entre la estructura planar presentada por este tipo de moléculas y el centro activo del complejo enzimático soportado por un estudio *in-silico* de los compuestos sintetizados.

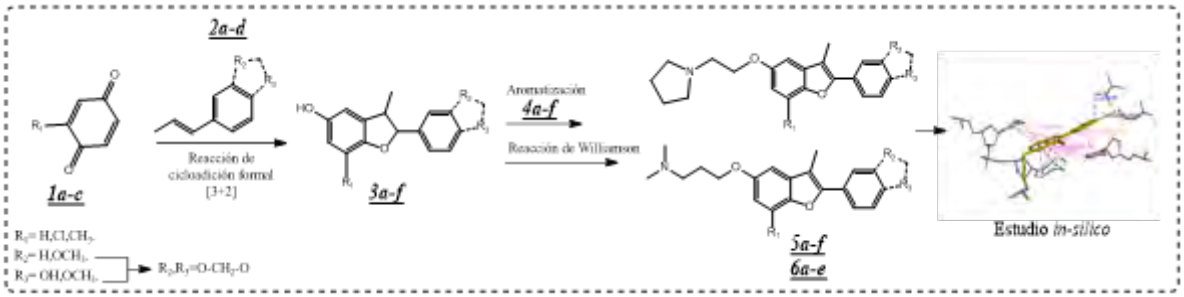


Figura 1. Síntesis de los derivados 5-*O*-aminoalquil-2-aril-3-metilbenzo[*b*]furánicos ***5a-f*** y ***6a-e***.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-466-O ***Recientes Aplicaciones de Solventes Eutécticos y Aceites Esenciales en la Síntesis Sostenible de Compuestos Heterocíclicos***

Recientes Aplicaciones de Solventes Eutécticos y Aceites Esenciales en la Síntesis Sostenible de Compuestos Heterocíclicos

Cristian Ochoa Puentes [a]*

[a] *Laboratorio de Síntesis Orgánica Sostenible, Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia-sede Bogotá, Bogotá, Colombia*

* *Autor de correspondencia: cochoapu@unal.edu.co*

Palabras Claves: aceites esenciales, solventes eutécticos, tetrahidroquinolinas, benzazepinas, química verde

El desarrollo y aplicación de la química sostenible en diferentes actividades industriales e investigativas ha generado un impacto altamente positivo para la sostenibilidad y la preservación del medio ambiente. Durante la última década se han hecho importantes aportes en la síntesis orgánica enfocados a implementar los 12 postulados de la química verde propuestos por Anastas y Warner.[1] Dentro de estas investigaciones, el uso de solventes alternativos y empleo de materias primas renovables representan quizás unas de las áreas de mayor interés ya que pueden sustituir muchos derivados del petróleo que son tóxicos y no renovables.

El propósito de este trabajo es mostrar la versatilidad, efectividad y bajo impacto ambiental de los solventes eutécticos (DES, por sus siglas en ingles), en la síntesis de diferentes derivados de tetrahidroquinolinas empleando la reacción multicomponente de Povarov. Adicionalmente, también se muestran los resultados más recientes y promisorios del uso de aceite esencial eucalipto, anís estrellado y hierba santa como solvente y precursores renovables con bajo impacto ambiental. Los resultados de estos estudios demuestran que diferentes derivados de tetrahidroquinolinas pueden ser obtenidos en buenos rendimientos y cortos tiempos de reacción empleando el DES cloruro de colina/cloruro de zinc y aceite esencial de anís estrellado como precursor.[2] Adicionalmente, diversos derivados policíclicos de tetrahidroquinolinas son fácilmente obtenidos empleando ácido 2-formilbenzóico e indeno.[3] Esta metodología puede ser fácilmente implementada en laboratorios de docencia para ilustrar la reactividad de aminas, aldehídos y cicloadiciones empleando el DES etilenglicol/cloruro de zinc.

Por otra parte, se evaluó el desempeño del aceite esencial de eucalipto como disolvente renovable en la reacción de Povarov empleando diferentes ácidos de Lewis encontrando que las tetrahidroquinolinas pueden ser obtenidas en cortos tiempos de reacción. Finalmente, una minuciosa búsqueda bibliográfica permitió identificar la hierba santa (*Piper auritum*) como una fuente renovable de precursores sintéticos; su aceite esencial fue obtenido y empleado en la síntesis de benzazepinas mediante una estrategia sintética de 4 pasos teniendo rendimientos globales entre 5-14%.

1. Anastas, P. T.; Warner, J. C. Green Chemistry: Theory and Practice, Oxford University Press: New York, 1998. **2**. Peñaranda Gómez, A.; Rodríguez Bejarano, O.; Kouznetsov, V. V.; Ochoa-Puentes, C. ACS Sustainable Chem. Eng. 2019, 7 (22), 18630-18639. **3**. Sanabria-Zánchez C., Kouznetsov, V. V.; Ochoa-Puentes. RSC Adv. 2023. Artículo aceptado (RA-ART-08-2023-005561).

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-509-O ***PELÍCULAS DE POLIHIDROXIBUTIRATO (PHB)-ÁCIDO POLILÁCTICO (PLA) COMO REEMPLAZO AL POLIETILENO EN LA AGROINDUSTRIA***

Películas de polihidroxibutirato (PHB)-ácido poliláctico (PLA) como reemplazo al polietileno en la agroindustria

Cesar A. Sierra,* Mónica Ávila, Carlos Zuluaga, Diego Castellanos

Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Colombia;

*casierraa@unal.edu.co

Resumen:

Como respuesta a las tendencias mundiales sobre el uso de plásticos de origen petroquímico, en países agroindustriales como Colombia, es necesario el desarrollo de materiales biodegradables basados en biopolímeros. Para lo cual además de tener en cuenta las propiedades fisicoquímicas y mecánicas, se deben considerar ventajas y desventajas de aspectos como la producción de gases de efecto invernadero, toxicidad, beneficios económicos y aplicabilidad, entre el biopolímero y el polímero que pretende reemplazar. En este trabajo mostraremos: A) el desarrollo de empaques basados en PHB/PLA como reemplazo de polietileno para el manejo postcosecha de cacao, chocolate y frutas tropicales. B) La búsqueda de aditivos de origen natural, y sus modificaciones sintéticas basadas en cálculos computacionales, como reemplazo de plaguicidas tóxicos en cultivos de banano. C) El uso de microcelulosa y nanocelulosa modificada sintéticamente como aditivo en biopelículas poliméricas con propiedades fisicoquímicas ajustadas a la necesidad metabólica del producto agroindustrial a empacar. D) El uso de biomasa residual como materia prima para la síntesis de PHB a escala semi-industrial. Y finalmente, E) la evaluación del efecto que cada una de estas variables tiene en la biodegradabilidad de polímeros como el PHB y PLA.

Bibliografía:

Ariza-Corredor, L.; Bohorquez-Torres, B.; Camargo-Jimenez, M.; AvilaMurillo, M.; Sierra, C. A.; Alzate-Sanchez, D. Antifungal packaging with coconut oil extract improved the storage of fresh tamarillo fruits. Future Foods, 2023, 100234

Ballesteros, S.; Salamanca, M.; Sierra, C. A.; Palomeque, L.; Castellanos, D. Determination of changes in physicochemical and sensory characteristics of purple passion fruit with the application of different packaging systems, including an ethylene scavenger additive. *J. Food Sci*. **2021**, 1372-1383

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Síntesis de Heterociclos: Un Viaje hacia Nuevos Compuestos Anticancerígenos

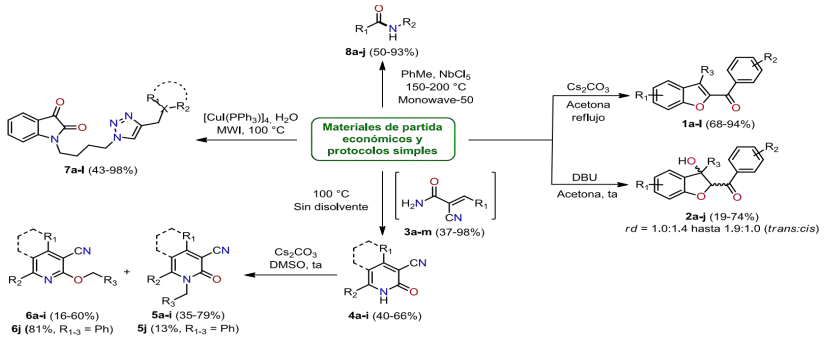
Juan Castillo [a,*] y Diana Becerra [a,*]

[a] *Grupo de Catálisis de la UPTC, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Colombia.*

**Autores de correspondencia: juan.castillo06@uptc.edu.co, diana.becerra08@uptc.edu.co*

Palabras Claves: Compuestos heterocíclicos, química verde, catálisis, actividad anticancerígena

Los compuestos heterocíclicos conteniendo nitrógeno y oxígeno se encuentran ampliamente distribuidos en productos naturales, fármacos y moléculas con actividad anticancerígena [1,2]. Según datos estadísticos, más del 59% de los fármacos de molécula pequeña aprobados por la FDA contienen al menos un heterociclo [1,2]. En los últimos años, nos hemos enfocado en la síntesis de compuestos heterocíclicos con potencial actividad anticancerígena empleando metodologías sintéticas simples y eco-compatibles [3]. En primera instancia, se llevó a cabo la reacción de condensación Rap-Stoermer para la síntesis de benzo[*b*]furanos **1** (68–94%). Posteriormente, se aplicó una reacción aldólica intramolecular para la formación de 3-hidroxi-2,3-dihidrobenzo[*b*]furanos **2** (19–74%) con una diastereoselectividad *trans*:*cis* desde 1.0:1.4 hasta 1.9:1.0 (Esquema 1). En segunda instancia, se implementó un protocolo tetracomponente para sintetizar 3-ciano-2(1*H*)-piridonas **4** (40–66%) vía la formación *in situ* de (*E*)-2ciano-3-(het)arilacrilamidas **3**. A continuación, se realizaron diversas funcionalizaciones en el heterociclo 3-ciano-2(1*H*)-piridona, destacando las reacciones de *N*- y *O*-alquilación que permitieron obtener de manera regioselectiva los productos *N*-alquilados **5** (13–79%) y *O*-alquilados **6** (16–81%). En una tercera instancia, se utilizó la catálisis heterogénea para la síntesis de 1,2,3-triazoles 1,4-disustituidos **7** (43–98%) y amidas secundarias **8** (50–93%) utilizando fuentes de calentamiento no convencional.



Esquema 1. Síntesis de compuestos heterocíclicos con actividad anticancerígena.

Los compuestos sintetizados se enviaron al National Cancer Institute (NCI) de los Estados Unidos para evaluar su actividad antitumoral *in vitro* frente a 60 líneas celulares tumorales humanas, utilizando una dosis única de 10 µM. De

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

estos compuestos, se seleccionaron ocho para un ensayo a cinco dosis, lo que arrojó excelentes resultados en términos de GI_{50} y LC_{50}.

Arce-Ramos, L., Castillo, J.-C., Becerra, D. *Pharmaceuticals* **2023**, *16*, 1265.
[1] Hurtado, D., Salinas, A., Rojas, H., Becerra, D., Castillo, J.-C. *RSC Adv.* **2022**, *12*, 35158.
[2] Serrano-Sterling, C., Becerra, D., Portilla, J., Rojas, H., Macías, M., Castillo, J.-C. *J. Mol. Struct.* **2021**, *1244*, 130944.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

III-193-O ***REPOSICIONAMIENTO IN SILICO DE FÁRMACOS PARA INHIBIR BLANCOS PROTEICOS DE TRYPANOSOMA CRUZI Y LEISHMANIA MAJOR***

Reposicionamiento *in silico* de fármacos para inhibir blancos proteicos de *Trypanosoma cruzi* y *Leishmania major*

Daniel A. Pardo[a,b,c], Juan M. Matiz[b, d], Juan S. Bravo[b], Paola A. Nocua[b], Juan C. Burgos[e], Jorge Robles[a], Claudia L. Cuervo[b], Sol M. Mejía[a] *

[a] *Grupo de Fitoquímica Universidad Javeriana, Pontificia Universidad Javeriana, Colombia*
[b] *Grupo de Enfermedades Infecciosas, Pontificia Universidad Javeriana, Colombia*
[c] *Metabolomics Core Facility—MetCore, Vice-Presidency for Research, Universidad de los Andes, Colombia*
[d] *Unidad de Genética y Resistencia Antimicrobiana, Universidad El Bosque, Colombia*
[e] *Grupo de Modelado Computacional, Universidad de Cartagena, Colombia*
** Autor de correspondencia: sol.mejia@javeriana.edu.co*

Palabras Claves: Enfermedad de Chagas; Leishmaniasis; Forodesine, Reposicionamiento, *In silico*

Las enfermedades de Chagas y Leishmaniasis causadas por *Trypanosoma cruzi* y diversas especies de *Leishmania*, respectivamente, representan un desafio para los tratamientos convencionales y el desarrollo de nuevos medicamentos. Para identificar blancos proteicos terapéuticos potenciales y fármacos de segundo uso con potencial para tratar estas enfermedades, un enfoque *in silico* fue implementado, para lo cual se utilizaron herramientas bioinformáticas como Blast para identificar blancos, descartando aquellos con similitud al proteoma humano y seleccionando proteínas homólogas con blancos proteicos no humanos del ChEMBL (criterios de similitud/homología: cobertura ≥ 30% y *e-value* ≤ 0.001). Se identificaron 41 fármacos con potencial para interactuar con proteínas de *T. cruzi* y 91 fármacos para *L. major*, incluyendo proteínas relacionadas con la regulación génica, la virulencia y el metabolismo redox de los parásitos. Se realizaron análisis estructurales y de acoplamiento molecular para demostrar la similitud estructural y la eficiencia energética de la interacción entre los fármacos y sus respectivos blancos en los parásitos, en comparación con los blancos reportados en el ChEMBL. El Forodesine se destacó como un posible inhibidor de la Nucleosido Fosforilasa, tanto para *T. cruzi* como para *L. major*, implicada en el metabolismo de las purinas, sugiriendo una potencial actividad tripanocida y leishmanicida. Los complejos, Forodesine-Enzima, están mediados por puentes de hidrógeno (ver Figura 1); que le confieren estabilidad de acuerdo a cálculos de dinámica molecular por triplicado de 300 ns.

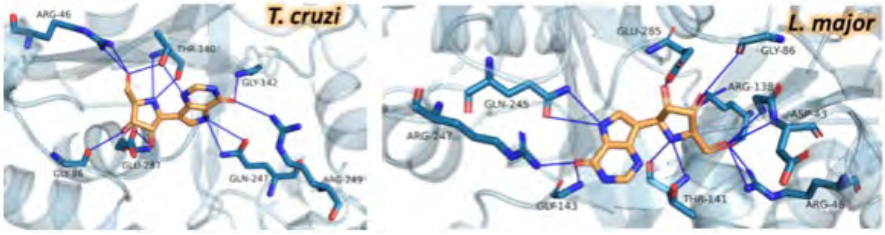


Figura 1. Interacciones intermoleculares entre el Forodesine y blancos proteícos de *T.cruzi* y *L. major*.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-195-O ***ESTUDIO DFT DE LA DEGRADACIÓN DE LA NIMESULIDA Y ESTIMACIÓN DE LA TOXICIDAD DE SUS PRODUCTOS DE DEGRADACIÓN***

Estudio DFT de la Degradación de la Nimesulida y Estimación de la Toxicidad de sus Productos de Degradación

Sofía Bettin [a*], Dayana Amell[a], Pedro J. Castro[a], Fernando Castro-Gómez [a]

[a] *Grupo de Investigación Max Planck, Universidad del Atlántico, Colombia*
* *Sofía Bettin: sbettin@mail.uniatlantico.edu.co*

Palabras Claves: Nimesulida; Degradación; DFT; toxicidad *in silico*

Actualmente los fármacos aintiinflamatorios no esteroideos (AINES) se encuentran entre los medicamentos más consumidos por la población mundial. La nimesulida es un AINE que inhibe selectivamente la COX-2, está indicada principalmente para tratar dolor agudo y dismenorrea primaria y que, según estudios recientes, posee efectos anticancerígenos [1]. Teniendo en cuenta las indicaciones de este fármaco, se hace necesario que se garantice su seguridad, es por esto que agencias como la Conferencia Internacional de Armonización (ICH) han establecido, en la guía ICH Q3A (R2), que las impurezas se abordan desde el punto de vista químico para su identificación y reporte y desde el punto de vista de seguridad con el fin de asegurar el bienestar del consumidor. En la Farmacopea Europea se menciona que la nimesulida genera seis productos de degradación (A, B, C, D, E y F) [2]. En diversos estudios experimentales y, en algunos computacionales, se han estudiado los productos de degradación de la nimesulida, sin embargo, en estos no se ha elucidado la ruta que llevó a la formación de dichos productos . Por tal motivo, en esta investigación se estudió a través de métodos DFT, a nivel ωB97XD y B3LYP/6-31 G(d), el mecanismo de degradación que sufre la nimesulida para la formación de cada producto de degradación. Adicionalmente se realizó una estimación de toxicidad para cada producto usando métodos *in silico* a través del software Toxicity Estimation Software Tool (TEST) versión 4.1, 2012 U.S. De acuerdo con los resultados, el mecanismo de degradación planteado corresponde a un proceso concertado desarrollado a través de 7 rutas de reacción, se encontró que la ruta 1, formación de producto-D, es la reacción cinética y termodinámicamente más favorable, y la ruta 4, formación de producto-B, la menos probable. El software de estimación de toxicidad TEST permitió la predicción del parámetro toxicológico Oral Rat LD50 y se obtuvo como resultado que la nimesulida y los productos B, C, y D son ligeramente tóxicos y los productos A, E, y F son moderadamente tóxicos.

Referencias:

[1] Ozleyen, A.; Yilmaz, Y. B.; Donmez, S.; Atalay, H. N.; Antika, G.; Tumer, T. B.; *J. Cancer Res. Clin. Oncol.* **2022**, 1. https://doi.org/10.1007/S00432-022-04187-8.
[2] Council of Europe. *European Pharmacopoeia*; **2014**; (Vol. II), 2856-285
[3] Kumar, S. A.; Bhaskar, B. L. *Asian J. Chem.* **2015**, *27* (10), 3907–3912. https://doi.org/10.14233/AJCHEM.2015.19068

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-197-O ***PROPIEDADES ELECTRÓNICAS RELACIONADAS CON LA ACTIVIDAD BIOLÓGICA DE DERIVADOS DE N-FENILMALEIMIDAS SUSTITUIDAS EN EL ANILLO AROMÁTICO MEDIANTE TÉCNICAS IN SILICO.***

Propiedades Electrónicas Relacionadas con la Actividad Biológica de derivados de N-fenilmaleimidas sustituidas en el anillo aromático mediante técnicas *in silico*.

Hector F. Cortes*, Hoover A. Valencia, Maribel Montoya, Oscar M. Mosquera, Jhony R. Rodríguez, Jhonny L. Cardona.

Grupo de Investigación en Fotocatálisis y Estado Sólido - GIFES, Escuela de Química, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.

* Autor de de correspondencia: hfcortes@utp.edu.co

Palabras Claves: Teoría de los funciones de la densidad; ángulo de torsión, grupos donadores y atractores de carga; acoplamiento molecular.

Las N-fenilmaleimidas sustituidas son compuestos orgánicos constituidos por dos anillos, uno de imida y otro aromático sustituido. Estas moléculas muestran aplicaciones en polímeros, materiales, síntesis orgánica, actividad biológica, entre otras, debido a su doble enlace carbono – carbono (C=C) en el anillo de imida y el ángulo de torsión que se genera entre los anillos de imida y benceno sustituido, provocando diferentes propiedades. A pesar de esto, falta ampliar el conocimiento en sistemas biológicos como molécula *hit*, y a posibles rutas de biodegradación tanto a nivel experimental como *in silico*. Es por ello que en el presente trabajo se realizó un estudio teórico de la actividad biológica antitumoral y antileishmanial de los isómeros derivados de la N-fenilmaleimida con grupos activadores y desactivadores. Las propiedades moleculares de los isómeros de N-fenilmaleimidas se realizaron cálculos por medio de la teoría de los funcionales de la densidad con el método ωB97XD/6-311++G(d,p), que contienen corrección de largo alcance. Con los resultados obtenidos se realizó una comparación de espectros IR y datos cristalográficos, entre las moléculas optimizadas y datos experimentales extraídos de diferentes bases de datos, evidenciando errores promedios menores al 5%, entre la teoria y el experimento. Posteriormente, se analiza las interacciones que describen el acoplamiento molecular con el campos de fuerzas de DOCK, en el sitio activo entre las dianas moleculares de la actividad antitumoral oxidorreductasa/inhibidor de oxidorreductasa (4gl7) y otra antileishmanial (7O50) hidrolasa con los isómeros derivados de la N- fenilmaleimida. Los derivados de N-fenilmaleimidas muestran potencial actividad con grupos desactivadores para 7O50 en cada una de las tríadas y en la 4gl7 para la primera triada y segunda diada.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-198-O ***DESCUBRIMIENTO DE NUEVOS ANTIMITÓTICOS INHIBIDORES DE TUBULINA MEDIANTE CRIBADO VIRTUAL BASADO EN FARMACÓFOROS***

Descubrimiento de Nuevos Antimitóticos Inhibidores de Tubulina Mediante Cribado Virtual Basado en Farmacóforos

Laura Gallego-Yerga [a,b,c], Rodrigo Ochoa [d], Isaías Lans [d], Carlos Peña-Varas [e], Melissa Alegría-Arcos [f], Pilar Cossio [d,g], Rafael Peláez [a,b,c,*], David Ramírez [e,*]

[a] *Laboratorio de Química Orgánica y Farmacéutica, Departamento de Ciencias Farmacéuticas, Facultad de Farmacia, Universidad de Salamanca, España*
[b] *Instituto de Investigación Biomédica de Salamanca (IBSAL), Facultad de Farmacia, Universidad de Salamanca, España*
[c] *Centro de Investigación de Enfermedades Tropicales de la Universidad de Salamanca (CIETUS), Facultad de Farmacia, Universidad de Salamanca, España*
[d] *Biophysics of Tropical Diseases, Max Planck Tandem Group, University of Antioquia UdeA, 050010 Medellin, Colombia*
[e] *Departamento de Farmacología, Universidad de Concepción, Chile*
[f] *Facultad de Ingeniería y Negocios, Universidad de las Américas, Santiago, Chile*
[g] *Center for Computational Mathematics, Flatiron Institute, NY, United States*
** Autor de correspondencia: dramirezs@udec.cl*

Palabras Claves: Cribado virtualbasado en farmacóforos; Tubulina; Colchicina, Diseño de fármacos Antimitóticos

La tubulina es un target validado para herbicidas, fungicidas, antiparasitarios y fármacos antitumorales. Muchos de los fármacos no cancerígenos para la tubulina se unen a su sitio de colchicina, pero no se dispone de ningún fármaco anticancerígeno con sitio de unión a colchicina. El sitio de la colchicina se compone de tres subbolsillos interconectados que se ajustan a sus ligandos y modifican la preferencia de los demás, lo que hace que el diseño de híbridos moleculares (que se unen a más de un subbolsillo) sea una tarea difícil. Aprovechando las más de ochenta estructuras de rayos X publicadas de tubulina en complejo con ligandos unidos al sitio de la colchicina, generamos un conjunto de representaciones farmacóforas que muestrean de forma flexible el espacio interaccional entre los ligandos y el target. Buscamos en la base de datos de ZINC núcleos químicos capaces de encajar en varios de los subespacios, como tetrazoles, sulfonamidas y diarilmetanos, y seleccionamos aproximadamente ~8000 compuestos con propiedades predichas favorables.

Se realizó un cribado virtual Flexi-pharma, basado en eun conjunto de farmacóforos, mediante dos metodologías diferentes. Combinando los núcleos químicos que mejor se ajustaban al conjunto farmacóforo-representación, diseñamos una nueva familia de moléculas, dando lugar a un nuevo modulador de la tubulina. Sintetizamos el tetrazol (5) y lo ensayamos como inhibidor de la tubulina in vitro. En buena concordancia con los principios de diseño, demostró actividad micromolar contra la polimerización de tubulina in vitro y efecto antiproliferativo nanomolar contra células HeLa de carcinoma epitelioide humano a través de la disrupción de microtúbulos, como se demostró por microscopía confocal de inmunofluorescencia. La metodología presentada acá ha tenido éxito en el diseño de nuevos núcleos químicos para proteínas flexibles con acoplamiento estructural entre bolsillos, ampliando así la forma en que los métodos computacionales pueden utilizarse como herramientas significativas en el proceso de diseño de fármacos.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-199-O EVALUACIÓN E IDENTIFICACIÓN DE NUEVOS INHIBIDORES DE LA PROTEÍNA MDM2 CON SU COMPLEJO P53 BASADO EN DOCKING MOLECULAR

Evaluación e Identificación de Nuevos Inhibidores de la Proteína MDM2 con su Complejo P53 basado en Docking Molecular.

Luis A Guerrero [a], Diego I Ariza [b] *, James O Guevara [c]

[a] *Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Colombia*

[b] *Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Colombia*

[c] *Universidad del Bosque, Colombia*

** Autor de correspondencia: diarizar@udistrital.edu.co*

Palabras Claves: Docking molecular, Inhibidores, MDM2, Cáncer

La siguiente investigación tuvo como objetivo identificar y optimizar compuestos candidatos en la inhibición de la proteína minuto doble murino (MDM2) y el complejo que forma con p53, esto debido a que la proteína MDM2 es un regulador negativo de la p53 en la cual se unen moléculas de ubiquitina a la proteína (p53) para su consecuente eliminación por el proteasoma, dicha p53 juega papel crucial en la detención del ciclo celular y estimulación de la apoptosis, por ende la inhibición de la proteína MDM2 se ha empleado recientemente como tratamiento anticancerígeno. Teniendo en cuenta lo anterior, se evaluaron las energías de afinidad de los fármacos ya existentes (Nutlin-3, AMG-232 y RG7388, entre otras) mediante el uso de Autodock Vina, cabe resaltar que la determinación del sitio activo se realizó a partir del software "ProteinPlus" en su apartado "DoGSiteScorer", posteriormente se filtraron los fármacos existentes por medio de la comparación de las energías de afinidad desde un consenso establecido, y se realizaron los ensayos tanto farmacocinéticos como toxicocinéticos haciendo uso de los softwares SwissADME y PreADMET respectivamente, una vez terminados dichos filtros se realizó la identificación del farmacóforo para su posterior empleo en el diseño y evaluación de nuevos fármacos, para ello se utilizó el software "Discovery Studio Visualizarer" y se procedió a diseñar nuevos inhibidores teniendo como base dicho farmacóforo y las propiedades del sitio activo. Después de recopilados y analizados todos estos datos se pudo concluir que los compuestos que presentan una mayor viabilidad en la inhibición de la proteína MDM2 son Nutlin-3, AMG-232, C10, C16, GMP1, junto con las propuestas 17 y 26.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-228-O ***COMPRENDIENDO LA INTERACCIÓN ENTRE NANOPARTÍCULAS DE ORO FUNCIONALIZADAS CON DERIVADOS DE AMINOÁCIDOS Y PROTEÍNAS CON RESIDUOS CARGADOS POSITIVAMENTE.***

Comprendiendo la interacción entre nanopartículas de oro funcionalizadas con derivados de aminoácidos y proteínas con residuos cargados positivamente

Marcia Y. Castillo [a*], Gian P. Miscione [a], Sebastian Franco[a,b]

[a] *Computational Bio-Organic Chemistry, Universidad de los Andes, Bogotá Colombia*
[b] *Molecular Modeling and Drug Discovery,Instituto Italiano de Tecnología, Genova, Italia*

**Autor de correspondencia: m.castillot@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: Nanopartículas de oro; proteínas; dinámica molecular; termodinámica.

Las nanopartículas de oro (AuNPs) funcionalizadas con derivados de aminoácido han generado un gran interés en aplicaciones biomédicas. [1,2] Una de las principales razones de su aplicación es su unión con proteínas. [3] La unión sucede por complementariedad de carga, es decir, AuNPs con carga negativa se unen a proteínas que presentan residuos ionizados a su carga positiva. Entre estas proteínas se encuentran citocromo C (Cit-C) y a-quimotripsina (ChT). Sin embargo, reportes experimentales han demostrado que la unión entre las AuNPs de carga negativa con Cit-C y ChT son favorecidos por cambios termodinámicos diferentes. La unión entre AuNPs con Cit-C se favorecen por cambios entrópicos mientras que la unión AuNPs con ChT se favorecen por cambios entalpícos. Se utilizaron métodos de modelamiento computacional como mecánica molecular, dinámicas moleculares y cálculos de energía libre de unión para explicar los comportamientos termodinámicos diferentes. Los cambios de entalpía y entropía en la unión de cada complejo AuNP-Proteína encontrados se deben a procesos de desplazamiento de moléculas de agua sobre la superficie de cada proteína, creación de puentes de hidrógeno en la interfaz AuNP-Proteína y a mantener intactos puentes de hidrógeno intermoleculares entre AuNP-solvente y/o proteína-solvente. La diferencia de los comportamientos termodinámicos radica en la proporción en cómo se distribuyen estos procesos en cada complejo AuNP-Proteína.

Referencias:

1- Fan,J., Cheng,Y, and Sun,M.; *Chem. Rec*. **2020**,12(20),1474–1504.
2- Entezari, M., Abad, G. G. Y., Sedghi, B., Ettehadi, R., Asadi, S., Beiranvand, R., & Ertas, Y. N. *Environmental Research*, **2023**, (225), 115673-78.
3- De M, You C-C, Srivastava S, Rotello VM.; *J Am Chem So*. **2007**, 129(35), 10747–53.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-232-O EFECTO DEL DOPADO DE ALUMINIO EN LA FORMACIÓN Y CRECIMIENTO DE NANOPARTÍCULAS DE TITANIA POR DINÁMICA MOLECULAR REACTIVA

Efecto del Dopado de Aluminio en la Formación y Crecimiento de Nanopartículas de Titania por Dinámica Molecular Reactiva

Diego Chaparro [a], * Eirini Goudeli [a]

[a] *Department of Chemical Engineering, University of Melbourne, Melbourne, Australia*
** Autor de correspondencia: dchaparrogut@student.unimelb.edu.au*

Palabras Claves: Titania; Nanotecnología; Dinámica Molecular Reactiva; Dopado; Sinterización

Las nanopartículas de Titania (TiO_2) tienen diversas aplicaciones en el mercado, incluyendo cosméticos, materiales fotocatalíticos y sensores químicos. Estas aplicaciones dependen en gran medida de la cristalinidad y el tamaño de las nanopartículas de TiO_2. Los métodos de síntesis en llama son populares en el diseño de nanopartículas de óxidos, ya que es un proceso escalable y permite controlar el tamaño de partículas primarias al ajustar los parámetros del proceso. Sin embargo, la dinámica de la cristalinidad ha sido pobremente explorada y generalmente se controla empíricamente mediante la adición de dopantes (silicio o aluminio). En el presente trabajo se utilizan simulaciones de Dinámica Molecular (MD) para explorar las etapas tempranas del crecimiento de partículas y la dinámica de cristalinidad de TiO_2 en presencia de dopante de aluminio. Además, se investiga la sinterización de las nanopartículas de TiO_2 recién formadas a T = 1800 - 2200 K, teniendo en cuenta las moléculas de aire ambiente durante la sinterización, que suelen ser omitidas en trabajos anteriores de MD. La Figura 1 muestra secciones transversales de una nanopartícula de titania (fase cristalina rutilo) de 3 nm a T = 1800 K. Las dos partículas se adhieren entre sí, formando un cuello cuyo diámetro aumenta hasta obtener una estructura compacta. Además, se estudia el efecto del dopaje con Al en la formación y sinterización de TiO_2 para diversas concentraciones de dopante en la Figura 2. Se observa una formación más rápida de agregados a mayores relaciones molares Al/Ti consistente con experimentos. Estos resultados permiten una mayor comprensión de los complejos mecanismos de formación de cristales de TiO_2 durante síntesis a temperaturas altas y podría ser útil para mejorar el control de la cristalinidad del producto final.

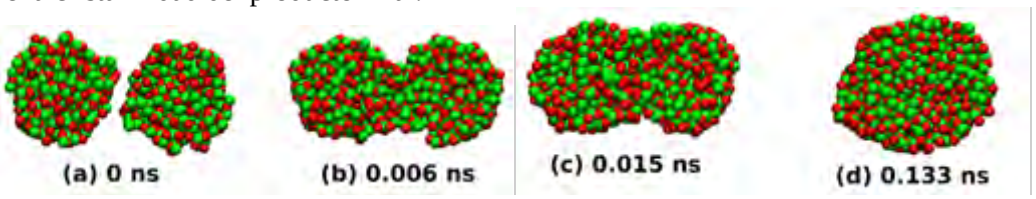


Figura 1: Secciones transversales de dos nanoparticulas de 3 nm durante sinterizado a 1800 K (Verde-Ti, Rojo-O)

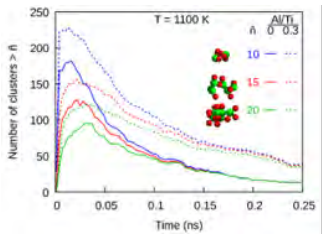


Figura 2: Evolución temporal del número de agregados de titania a 1100 K en ausencia (líneas continuas) y en presencia de Al (líneas punteadas)

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Descubriendo la Fuerza Oculta de la Nanocelulosa

Angel M. Fuentes [a,b,c,*], Aldo F. Combariza [a,b], Heriberto P. Pedraza [a,b]

[a] Departamento Física, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de Pamplona- (Pamplona-norte de Santander-Colombia)
[b] *Grupo de Investigación en Modelamiento Molecular y Simulación Computacional - IN SILICO, UniSucre*
[c] *Departamento de Biología y Química, Facultad de Educación y Ciencias, Universidad de Sucre (UniSucre)*

** Autor de Correspondencia: angel.fuentes2@unipamplona.edu.co*

Palabras Claves: dinámica molecular; propiedades mecánicas; campos de fuerza; biomateriales; simulaciones computacionales.

Vamos a describir el uso de fibras naturales como la celulosa para el desarrollo de materiales biocompuestos. Estos biomateriales no solo tienen un bajo impacto ambiental, sino que también ofrecen sostenibilidad y funcionalidad biológica debido a sus propiedades mecánicas excepcionales útiles para reforzar otros materiales. El proceso inicia con la obtención de datos de la estructura molecular mediante el programa de química computacional ORCA Versión 4.2.1, optimizando geométricamente el dímero de la celubiosa. A través de cálculos secuenciales(donde cada resultado obtenido en una etapa será utilizado como entrada para el cálculo subsiguiente, formando así una cadena de cálculos optimizados geométricamente) evaluamos la teoría y el basis set adecuados. Donde según los benchmarks realizados, seleccionamos el basis set 6-311G* y la teoría DFT -B3LYP. Con el fin de ver la termoestabilidad de la celulosa, se graficaron las propiedades termodinámicas: energías internas, entalpía y energía libre de Gibbs a temperaturas de 77 K,298.13 K,330 K,440 K y se observan patrones consistentes en las propiedades termodinámicas evaluadas. A una temperatura de 77 K, se identificaron valores específicos de U, ΔH y ΔG que muestran una relativa estabilidad del sistema en este punto frío ya que tiene valores de energía muy cercanos. A medida que la temperatura aumenta a 298.13 K, sus valores de energía cambian evidenciando una respuesta ante las fluctuaciones térmicas. Este comportamiento sigue siendo coherente al aumentar la temperatura a 330 K, Sin embargo, es interesante destacar que a 440 K se observa una alteración más significativa en las propiedades termodinámicas. Estos hallazgos podrían indicar la posible degradación de la celulosa a temperaturas más altas, lo cual es crucial para comprender su límite de termoestabilidad en aplicaciones potenciales. Procedemos a re-parametrizar el campo de fuerza (FF) AMBER14SB, para medir propiedades mecánicas con nuestro modelo. Ejecutaremos la sustitución del residuo interno de piranosa por la estructura de glucosa. Este procedimiento requerirá la implementación de ajustes en los archivos de topología y enlaces, elementos fundamentales que delimitan los componentes del FF. Luego se crearon los sistemas con condiciones periódicas de frontera para simular un material macroscópico, Se utilizó el programa GROMACS V. 2021.2 para estudiar la celulosa, minimizando inicialmente un sistema de 10 dímeros. La minimización emplea el algoritmo de descenso de gradiente, con un criterio de convergencia de 100 kL/Mol/nm. Se equilibra usando NVT y NPT con el integrador md y paso de tiempo de 0.02. Por último, se realiza la producción del sistema. Finalmente se pretende comparar las propiedades mecánicas obtenidas con las reportadas en la literatura y de esta forma validar el modelo desarrollado.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-325-O ESTUDIO TEÓRICO Y ANÁLISIS TOPOLÓGICO DEL MECANISMO DE UNA CICLOADICIÓN TANDEM 1,3-DIPOLAR ALTAMENTE REGIOSELECTIVA PARA LA FORMACIÓN DE ISOXAZOLES ENTRE 1,1-DIÉSTERES DE CICLOPROPENO Y ÓXIDOS DE NITRILO

Estudio Teórico y Análisis Topológico del Mecanismo de una Cicloadición Tandem 1,3-Dipolar Altamente Regioselectiva para la Formación de Isoxazoles Entre 1,1-Diésteres de Ciclopropeno y Óxidos de Nitrilo

Jesús Marañón-Medina. *[a], Julio R. Maza [a]

[a] *Semillero de Investigación QuanTops, adscrito al grupo de Investigación en Química Orgánica Biomédica, Universidad del Atlántico, Colombia*

** Autor de correspondencia: jemaranon@mail.uniatlantico.edu.co*

Palabras Claves: Isoxazoles; Mecanismo de reacción; Coordenada Intrínseca de Reacción; QTAIM; Energy Density.

Los isoxazoles son anillos heterociclos de cinco miembros que contienen dos heteroátomos, nitrógeno y oxígeno en su estructura, exhiben propiedades químicas y biológicas, aplicadas en el diseño de fármacos, electrodos y como inhibidor de corrosión en superficies metálicas, además de poseer actividad antimicrobiana, antiinflamatorias pasando también como agente antituberculoso y siendo un gran candidato anticancerígeno. Se realizó la caracterización teórica del estado de transición para la elucidación del mecanismo de reacción para la formación de isoxazoles descrito por S. Chen, J. Ren, y Z. Wang[1], que conlleva al reordenamiento molecular descrito en la **Figura 1**, mediante la migración de un átomo de hidrógeno periférico hacia el núcleo del isoxazol, permitiendo el reordenamiento electrónico dentro del anillo, empleando el uso de DFT con el funcional M06-2X y el conjunto base 6-31G(d,p). Se calcularon 63 puntos a lo largo de la coordenada intrínseca de reacción (CIR). Un posterior análisis topológico, empleando la teoría cuántica de átomos en moléculas [2], TCAEM, de cada uno de los puntos del CIR permitió conceptualizar y analizar la desaparición y formación de puntos críticos de enlace a lo largo de la reacción que se lleva a cabo, y para todos los pasos del CIR la relación de Poincaré-Hopf fue satisfecha. En adición, un análisis de la energía de densidad (energy density), permitió evidenciar que para esta reacción, el balance entre la energía cinética de los electrones, descrita por el término del gradiente y la energía electrostática potencial indica que la transición está dominada por la energía cinética hasta el instante en que la migra del átomo de hidrógeno ocurre, para luego ser dominada por el factor termodinámico representado en la reacción y descrita en la **Figura 2**.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-336-O ***EXPLORACIÓN DE PROCESOS DE TRANSFERENCIA DE CARGA EN FASE GASEOSA EN MALDI MS PARA EL ANÁLISIS DE PIGMENTOS FITOPLANCTÓNICOS***

Exploración de procesos de transferencia de carga en fase gaseosa en MALDI MS para el análisis de pigmentos fitoplanctónicos

Maria J. Álvarez[a,b,c,*], Carlos A. Padilla[b,c], Luis M. Díaz-Sánchez [c], Marianny Y. Combariza [c], Cristian Blanco-Tirado [c], y Aldo. F. Combariza [a,b,c]

[a] *Departamento de Biología y Química, Facultad de Educación y Ciencias, Universidad de Sucre (UniSucre)*
[b] *Grupo de Investigación en Modelamiento Molecular y Simulación Computacional - IN SILICO, UniSucre*
[c] *Escuela de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Industrial de Santander (UIS)*
** Autor de Correspondencia: maria.alvarez@unisucrevirtual.edu.co*

Palabras Claves: Afinidad Protónica, MALDI, Química cuántica, Pigmentos fotosintéticos/fotoprotectores, Espectrometría de Masas.

La quimiotaxonomía del fitoplancton se basa en perfiles pigmentarios que pueden medirse usando espectrometría de masas (MS) MALDI ("*Matrix-Assisted Laser Desorption/Ionization*"). La ionización en MALDI, se puede dar por diferentes vías como transferencia protónica (PT), catiónica (CT) o electrónica (ET), dependiendo de la naturaleza química de la matriz y del analito. Anteriormente, hemos reportado matrices MALDI para el análisis de pigmentos fotoprotectores y fotosintéticos mediante reacciones ET en fase gaseosa (*e.g.*, α-CNPV-CH_3 y α-CNPV-OCH_3) [1]. Interesantemente, algunos derivados CNPVs mostraron dualidad de funcionalidad PT y ET simultáneamente. Por lo tanto, nuestro objetivo fue entender la reactividad PT y ET asociada a estas matrices en mención y pigmentos de tipo clorofila y caroteno, a través de cálculos químico-cuánticos de afinidades protónicas (PA) localizadas y basicidades en fase gaseosa (GB). A los compuestos a los que se les calcularon sus valores de PT fueron ácido 2,5-dihidroxibenzoico (2,5-DHB) y ácido α-ciano-4-hidroxicinámico (CHCA), así como a las matrices ET MALDI DCTB, α-CNPV-CH_3 y α-CNPV-OCH_3 y pigmentos tipo caroteno y derivados de clorofila. Hartree-Fock (HF) y Møller-Plesset (MP2) se usaron para optimizar las geometrías y calcular los parámetros termodinámicos de entropía (S) y energía de punto cero (ZPE) bajo condiciones estándar (*i.e.*, 1 atm y 298,15 K), a partir de los cuales se determinaron los valores de entalpía de protonación y basicidad en fase gaseosa. Los sitios de protonación fueron determinados usando mapas de potencial electrostático (MEP) y análisis de población de cargas Mülliken (MPA) y Löwdin (LPA). Los datos MEP, MPA y LPA guiaron el proceso de identificación de sitios reactivos de protonación y distribuciones de carga en las moléculas, con lo cual se redujo el número de protonaciones a realizar. Puntualmente, los valores PA calculados para el 2,5-DHB se encuentran entre 757,6 y 818,7 kJ/mol, y concuerdan con los informes experimentales que oscilan entre 849 y 858 kJ/mol, lo que indica que nuestros cálculos tienen porcentajes de error bajos [2]. Al contrastar PA y GB de matrices y analitos, se evidencia que la transferencia protónica se ve favorecida desde matrices como DHB, CHCA, mientras que para α-CNPV-CH3, α-CNPV-OCH3 y DCTB el delta de PA en contraste con los analitos es bajo con lo cual un proceso de ET se ve más favorecido de acuerdo a reportes previos [3]. Aun así, y debido a la presencia de hidrógenos acídicos en sus estructuras, tanto los derivados CNPV's como el DCTB pueden formar especies protonadas en fase gaseosa en MALDI.

[1] Díaz-Sánchez, L. M., Blanco-Tirado, C., & Combariza, M. Y. (2023). Electron-transfer MALDI MS methodology for microalgae/phytoplankton pigments analysis. *MethodsX*, *10*, 102140.
[2] Rebber, B. L., Halfacre, J. A., Beran, K. A., Beller, N. R., Gomez, M., Bashir, S., ... & Derrick, P. J. (2006). Theoretical investigation of the proton affinity and gas-phase basicity of neutral x, y-dihydroxybenzoic acid and its derivatives. *European Journal of Mass Spectrometry*, *12*(6), 385-396.
[3] Padilla-Jaramillo, C. A., Díaz-Sánchez, L. M., Combariza, M. Y., Blanco-Tirado, C., & Combariza, A. F. (2021). Photon harvesting molecules: ionization potential from quantum chemical calculations of phytoplanktonic pigments for MALDI-MS analysis. Orinoquia, 25(1), 13-23.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-364-O ***Estudio Teórico Y Análisis Topológico Del Mecanismo De Una Cicloadición Tandem 1,3-Dipolar Altamente Regioselectiva Para La Formación De Isoxazoles Entre 1,1-Diésteres De Ciclopropeno Y Óxidos De Nitrilo.***

Modelado Tridimensional del Canal de Ca^{2+} Activado por Nucleótidos Cíclicos en *Solanum lycopersicum* L.,. Estudio Teórico

Juan C Tayac Giraldo [a,*], **Jose M Rodas Rodríguez** [a], **Javier I Torres-Osorio** [b]

[a] Grupo de investigación en química teórica y bioinformática, *Departamento de química, Universidad de Caldas, Colombia*
[b] Grupo de investigación en Magnetobiología, *Departamento de física, Universidad de Caldas, Colombia*

* *Juan C Tayac Giraldo: camilo.tayac@ucaldas.edu.co*

Palabras Claves: CNGC6, proteína de membrana; modelado de proteína; filogenia, transporte de calcio.

Los canales activados por nucleótidos cíclicos (CNGC) están involucrados en con el desarrollo de las plantas mediante diversos procesos como la homeostasis iónica y la regulación de la absorción celular del Ca^{2+}. Sin embargo, la estructura del CNGC6 de *Solanum lycopersicum* L., no se ha dilucidado experimentalmente. El objetivo de este trabajo fue estructurar, modelar y caracterizar computacionalmente el homotetrámero de CNGC6 de *Solanum lycopersicum* L. Para esto se obtuvo la estructura del monómero CNGC6, a partir la base de datos *AlphaFold* y se refinaron los *loops* con un pLDDT menor a 75 con el paquete *MODELLER*. La caracterización se realizó con *Phobius*, SMART e *InterPro* para determinar las regiones transversales a la sección de la membrana y los dominios de la proteína. Además, se construyó el homotetrámero con *HDOCK* y se determinó la región de contacto del homotetramero con la membrana al usar PPM 3.0. Luego se efectuó la caracterización del poro del homotetramero de CNGC6 con *MOLEonline*. Se encontraron siete regiones del monómero en la dirección transversal a la membrana coincidentes con los reportes actuales. En la región de residuos de aminoácidos 479 al 610 se encuentran, una región de unión de bisagra y la región del dominio de unión nucleótidos cíclicos, en el que específicamente se ubica el motivo de unión cAMP/cGMP. El homotetramero tiene cuatro *loops* que indicarían el lugar de apertura y cierre del canal. Este canal tiene un poro con una longitud de 18.03 nm y un radio de cuello de botella de 0.07 nm. Finalmente, el poro tiene una región extracelular con carga negativa que permite la selectividad de cationes y en la parte intracelular tiene una región de carga positiva que impide que cationes entren al poro; lo que determina la dirección dé flujo iónico a través del canal. De esta manera, se ha logrado obtener un modelo tridimensional del CNGC6 refinado y caracterizado, lo que permite el uso posterior para el estudio de la dinámica de transporte de iones Ca^{2+} a través de la membrana plasmática, conocimiento indispensable para la comprensión de otros fenómenos dependientes del Ca^{2+} en células vegetales.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-365-O MODELADO TRIDIMENSIONAL DEL CANAL DE CA2+ ACTIVADO POR NUCLEÓTIDOS CÍCLICOS EN SOLANUM LYCOPERSICUM L.,. ESTUDIO TEÓRICO

Modelado Tridimensional del Canal de Ca^{2+} Activado por Nucleótidos Cíclicos en *Solanum lycopersicum* L.,. Estudio Teórico

Juan C Tayac Giraldo [a, *], Jose M Rodas Rodríguez [a], Javier I Torres-Osorio [b]

[a] Grupo de investigación en química teórica y bioinformática, *Departamento de química, Universidad de Caldas, Colombia*

[b] Grupo de investigación en Magnetobiología, *Departamento de física, Universidad de Caldas, Colombia*

* *Juan C Tayac Giraldo: camilo.tayac@ucaldas.edu.co*

Palabras Claves: CNGC6, proteína de membrana; modelado de proteína; filogenia, transporte de calcio.

Los canales activados por nucleótidos cíclicos (CNGC) están involucrados en con el desarrollo de las plantas mediante diversos procesos como la homeostasis iónica y la regulación de la absorción celular del Ca^{2+}. Sin embargo, la estructura del CNGC6 de *Solanum lycopersicum* L., no se ha dilucidado experimentalmente. El objetivo de este trabajo fue estructurar, modelar y caracterizar computacionalmente el homotetrámero de CNGC6 de *Solanum lycopersicum* L. Para esto se obtuvo la estructura del monómero CNGC6, a partir la base de datos *AlphaFold* y se refinaron los *loops* con un pLDDT menor a 75 con el paquete *MODELLER*. La caracterización se realizó con *Phobius*, SMART e *InterPro* para determinar las regiones transversales a la sección de la membrana y los dominios de la proteína. Además, se construyó el homotetrámero con *HDOCK* y se determinó la región de contacto del homotetramero con la membrana al usar PPM 3.0. Luego se efectuó la caracterización del poro del homotetramero de CNGC6 con *MOLEonline*. Se encontraron siete regiones del monómero en la dirección transversal a la membrana coincidentes con los reportes actuales. En la región de residuos de aminoácidos 479 al 610 se encuentran, una región de unión de bisagra y la región del dominio de unión nucleótidos cíclicos, en el que específicamente se ubica el motivo de unión cAMP/cGMP. El homotetramero tiene cuatro *loops* que indicarían el lugar de apertura y cierre del canal. Este canal tiene un poro con una longitud de 18.03 nm y un radio de cuello de botella de 0.07 nm. Finalmente, el poro tiene una región extracelular con carga negativa que permite la selectividad de cationes y en la parte intracelular tiene una región de carga positiva que impide que cationes entren al poro; lo que determina la dirección dé flujo iónico a través del canal. De esta manera, se ha logrado obtener un modelo tridimensional del CNGC6 refinado y caracterizado, lo que permite el uso posterior para el estudio de la dinámica de transporte de iones Ca^{2+} a través de la membrana plasmática, conocimiento indispensable para la comprensión de otros fenómenos dependientes del Ca^{2+} en células vegetales.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-404-O ***ESTUDIO COMPUTACIONAL INTEGRADO DEL MECANISMO DE LA PET HIDROLASA PARA LA BIODEGRADACIÓN DEL TEREFTALATO DE POLIETILENO (PET)***

Estudio Computacional Integrado del Mecanismo de la PET Hidrolasa para la Biodegradación del Tereftalato de Polietileno (PET)

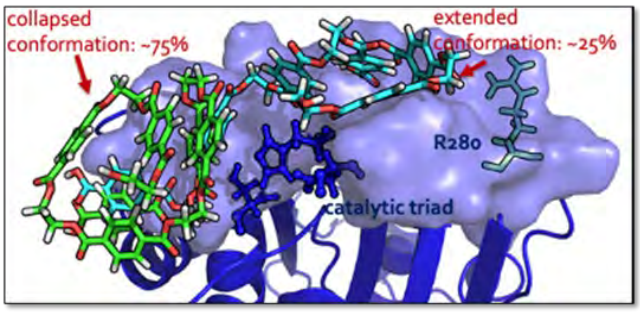
David Figueroa [a,b], Pietro Vidossich [a,b]* , Gian Pietro Miscione[a]*

[a] *Computational Bio- Organic Chemistry Bogotá, Universidad de los Andes (Colombia)*
[b] *Istituto Italiano di Tecnologia, Genova (Italia)*

** Autores de correspondencia: pietro.vidossich@iit.it, gp.miscione57@uniandes.edu.co*

Palabras claves: dinámicas moleculares, enzimas, metadinámica, *docking* molecular

El tereftalato de polietileno (PET) es un polímero cuya resistencia a ácidos y aceites minerales, ductilidad y rigidez lo convierten en una materia prima relevante a nivel industrial, siendo el componente principal del plástico. Sin embargo, su baja reactividad significa una desventaja en cuanto al reciclaje y la degradación, lo que provoca la acumulación de grandes cantidades de plástico. Por lo tanto, estudiar y concebir procesos químicos capaces de degradar este polímero permitiría abordar de manera práctica y eficaz el problema medioambiental. En 2016 se descubrió la bacteria *Ideonella sakaiensis*, que utiliza el PET como principal fuente de carbono y energía para su crecimiento, gracias a una enzima hidrolasa llamada PETasa. Comprender el mecanismo de catálisis de esta enzima y el reconocimiento molecular enzima-polímero podría facilitar el diseño de variantes mutadas de PETasa que funcionen con mayor eficacia y bajo mejores condiciones. Por lo tanto, en este estudio se analizaron los procesos mencionados anteriormente mediante varios métodos computacionales (*docking* molecular, dinámica molecular, metadinámica, métodos QM/MM).
Los resultados indican que, a diferencia de lo que sugieren estudios anteriores realizados a niveles de teoría más bajos y con polímeros de menor longitud, la conformación con la cual el polímero se acopla a la enzima e ingresa a su sitio activo es colapsada y no extendida (Figura 1). En esta conformación, el polímero se acerca y permanece cercano a la triada catalítica (histidina, serina, aspartato), interactuando principalmente con la enzima a través de estos tres residuos. El mecanismo de catálisis se caracteriza por dos pasos cinéticos: acilación (paso determinante de la velocidad) y desacilación. Las mutaciones deben tener como objetivo aumentar kcat y la termoestabilidad, en lugar de incrementar el volumen del surco hidrofóbico, como se sugirió anteriormente, ya que nuestros cálculos indican que el polímero ingresa al sitio activo con relativa facilidad en conformación colapsada. En este sentido, estamos realizando estudios con el método de *Free Energy Perturbation* (FEP) para predecir la termoestabilidad de la enzima cuando se introducen mutaciones.



Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Figura 1: La dinámica molecular indica que la conformación preferida del polímero es colapsada

III-406-O AVENTURÁNDOSE EN NUEVOS TERRITORIOS DE MATRICES MALDI: UNA RED NEURONAL ARTIFICIAL PARA CARTOGRAFIAR EL COSMOS QUÍMICO

Aventurándose en Nuevos Territorios de Matrices MALDI: Una Red Neuronal Artificial Para Cartografiar el Cosmos Químico

Carlos A. Padilla [a,b,c,*], **Luis M. Díaz** [a,b], **Marianny Y. Combariza** [a,b], **Cristian Blanco** [a,b] **y Aldo. F. Combariza** [b,c,d]

[a] *Escuela de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Industrial de Santander (UIS)*
[b] *Grupo de Investigación en Fisicoquímica Teórica y Experimental (GIFTEX), UIS*
[c] *Grupo de Investigación en Modelamiento Molecular y Simulación Computacional - IN SILICO, UniSucre*
[d] *Departamento de Biología y Química, Facultad de Educación y Ciencias, Universidad de Sucre (UniSucre)*
* *Autor de Correspondencia: carlos2228058@correo.uis.edu.co*

Palabras Claves: Inteligencia Artificial; MALDI; Espectrometría de Masas; Química Cuántica; Diseño racional.

La espectrometría de masas (MS) con fuente de ionización tipo MALDI ("*Matrix-Assisted Laser Desorption/Ionization*") es una herramienta efectiva en análisis químico para la identificación de pigmentos fotosintéticos de interés biológico y biotecnológico [1]. Durante el análisis, se emplean matrices químicas de Transferencia Electrónica (ET) que median los procesos de ionización de estos analitos, lo cual evita su fragmentación molecular y mejora el proceso de interpretación de los espectros medidos. Sin embargo, la elección de matrices MALDI para obtener espectros con mejor resolución señal-ruido es una problemática latente que se suma a la limitada cantidad de compuestos comerciales para escoger y al complejo y tedioso proceso experimental de "ensayo y error" durante el desarrollo de nuevos compuestos. Por lo tanto, nuestro objetivo es diseñar matrices MALDI ET, a través de un modelo de IA generativo alimentado por datos de propiedades termoquímicas y optoelectrónicas teórico-experimentales en un proceso de aprendizaje por reforzamiento (RL) [2]. Inicialmente, se debe generar/delimitar el espacio químico, a través de una librería química basada en andamios moleculares de matrices MALDI ET comerciales, utilizando química combinatoria. El desarrollo de la librería está automatizada por funciones RDkit de Python y análisis de redes, grafos y árboles de andamios de Murcko. Referente a las reglas de combinación de andamios y grupos R, se han establecido sustituyentes como grupos ciano (-CN), carboxilos (-COOH), metil ($-CH_3$) y metoxi ($-OCH_3$) principalmente y núcleos basados en benceno, antraceno y fluoreno. Referente a las propiedades optoelectrónicas se han calculado energías de orbitales de frontera (HOMO-LUMO), Energía de ionización (E_i), Afinidad electrónica (EA), cargas parciales y afinidades protónicas (PA), usando niveles de teoría *ab initio* y DFT. Actualmente se están explorando cálculos a nivel semiempírico y la automatización del proceso usando el algoritmo "*Automated Quantum Mechanical Environment*" (AQME) y la creación del modelo generativo por RL usando REINVENT AI 3.2. Con este proyecto esperamos obtener una base de datos de compuestos *de novo* útiles como matrices MALDI ET para analizar una amplia variedad de compuestos lábiles y termoinestables de interés biológico y biotecnológico.

[1] Díaz-Sánchez, L. M., Blanco-Tirado, C., & Combariza, M. Y. (2023). MethodsX, Vol. 10, p. 102140. doi:10.1016/j.mex.2023.102140
[2] Kwak, H. S., An, Y., Giesen, D. J., Hughes, T. F., Brown, C. T., Leswing, K., Abroshan, H. & Halls, M. D. (2022).Frontiers in Chemistry, 9. https://doi.org/10.3389/fchem.2021.800370

QUÍMICA VERDE Y SOSTENIBLE

VI-213-O ***REMEDIACIÓN ELECTROQUÍMICA DE METALES PESADOS EN AGUA UTILIZANDO SUPERFICIES DE ELECTRODOS DE CARBONO MODIFICADAS CON 1,10-FENANTROLINA***

Remediación Electroquímica de Metales Pesados en Agua Utilizando Superficies de Electrodos de Carbono Modificadas con 1,10-fenantrolina

Drochss Valencia[a,*], Gloria Crespo[a], Mauro Bertotti[b], Andrés Jaramillo-Botero[a,c,*]

[a]Instituto Omicas, Pontificia Universidad Javeriana, Cl. 17 #121b-155, Cali, Valle del Cauca, Colombia [b]Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, Universidad de São Paulo, Av. Professor Lineu Prestes, 748, 05513-970 São Paulo - SP, Brazil, [c]Instituto de Tecnología de California (Caltech) Pasadena, CA 91125 Estados Unidos

** Autores de correspondencia:* ajaramil@caltech.edu, drochss.valencia@javerianacali.edu.co

Palabras Claves: Voltametría Cíclica, Remediación Electroquímica, Metales Pesados, Superficies de Carbono modificadas, Electrodos de Grafeno Inducidos por Láser (LIG).

Los metales pesados representan graves riesgos tanto para el medio ambiente como para la salud humana. Para abordar este problema, la comunidad científica, y la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (EPA), entre otras, han desarrollado técnicas y materiales para reducir o eliminar su presencia en el agua. Entre las técnicas empleadas se incluyen la adsorción de estas especies, la filtración por membrana y el intercambio de iones, que han demostrado ser efectivas para eliminar parcial o completamente estos metales en el agua. Sin embargo, muchas de estas técnicas implican costos elevados de energía y operación, lo que limita su implementación y sostenibilidad (doi.org/10.1016/j.molliq.2019.111197). En el presente trabajo presentamos la modificación de superficies de carbono de bajo costo, las cuales pueden ser utilizadas para la remediación de aguas contaminadas con metales pesados. Se modificaron las superficies de electrodos de carbono utilizando películas de 1,10-fenantrolina mediante un proceso de reducción electroquímica en medio ácido, como lo explica el mecanismo propuesto en la figura 1.A, en donde la 1,10-fenantrolina se protona mediante ácido sulfúrico (H_2SO_4) en solución acuosa, formando 1,10-fenantrolina protonada (especie II), la cual puede reducirse en el electrodo para formar radicales aromáticos estabilizados por resonancia, que pueden reaccionar entre sí o con la superficie del electrodo, modificándola (doi.org/10.1021/la500349t). Estas superficies de electrodos de carbono modificadas se emplearon para la remediación electroquímica de soluciones que contenían iones de plomo, mercurio, cadmio, zinc y cobre en concentraciones de 0 a 100 ppm. Se optimizaron parámetros como el potencial de deposición (-1.50 V), el tiempo óptimo para la remediación (50 s) y el pH adecuado de trabajo (4,50). Una vez optimizados los parámetros, se electro-remediaron soluciones con diferentes metales preparadas en el laboratorio, logrando una remoción significativa de metales como mercurio (60,2%), cadmio (54,8%), plomo (53,9%), zinc (51,03%) y cobre (42,6%), tal como se muestra en la Figura 1B. Con base en estos resultados, las superficies de grafeno modificadas pueden ser utilizados para la remediación de cuerpos de agua y ríos contaminados con metales pesados. De esta manera, se busca contribuir a la protección del medio ambiente y la salud pública, ofreciendo una alternativa eficiente y de bajo costo para la reducción de estos contaminantes.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

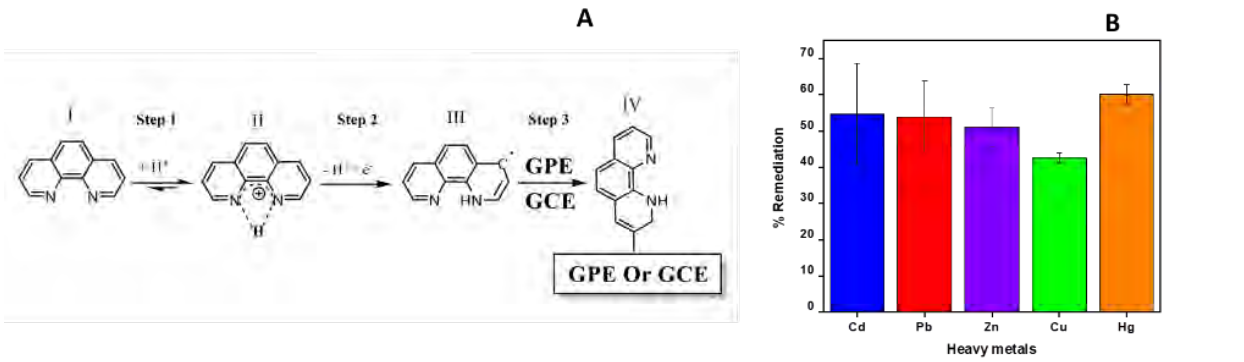


Figura 1. A) Mecanismo propuesto para la reducción electroquímica de 1,10-fenantrolina en medio ácido y modificación de superficies de electrodos de carbono. B) % Remediación de diferentes metales pesados a 100 ppm, mediante cronoamperometría.

Gloria Crespo agradece al Programa Jóvenes Investigadores e Innovadores en las regiones para atención de demandas definidas por los CODECTI de los Departamentos de Chocó, Valle del Cauca, Cauca y Nariño-BPIN 2022000100068, de Minciencias. Gloria Crespo y Drochss Valencia agradecen el apoyo al Dr. Mauro Bertotti, Jefe del Departamento de Química, del Instituto de Química de la Universidad de São Paulo (São Paulo, Brasil) por su colaboración y asesoría. Todos los autores agradecen el apoyo de la convocatoria multicampus de la Pontificia Universidad Javeriana.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VI-214-O AVANCES EN LA DETECCIÓN Y REMEDIACIÓN DE CONTAMINANTES EMERGENTES EN AGUA MEDIANTE SENSORES ELECTROQUÍMICOS BASADOS EN GRAFENO INDUCIDO POR LÁSER

Avances en la Detección y Remediación de Contaminantes Emergentes en Agua mediante Sensores Electroquímicos basados en Grafeno Inducido por Láser

Gloria Crespo[a], **Andres Jaramillo-Botero**[a,b,*], **Crispin Celis**[c], **Alejandro Pérez**[c], **Drochss Valencia**[a,*]

[a] *Instituto Omicas, Pontificia Universidad Javeriana, Cl. 17 #121b-155, Cali, Valle del Cauca, Colombia* [b] *Instituto de Tecnología de California (Caltech) Pasadena, CA 91125 Estados Unidos,* [c] *Facultad de Ciencias Pontificia Universidad Javeriana Cra. 7 #40 - 62, Bogotá, Colombia.*

* *Autores de correspondencia:* ajaramil@caltech.edu, drochss.valencia@javerianacali.edu.co

Palabras Claves: Remediación Electroquímica, Contaminantes Emergentes, Electrodos de Grafeno Inducidos por Láser (LIG), Procesos de Oxidación Avanzada.

Implica consiste

La creciente preocupación acerca del impacto de las actividades antropogénicas en el ciclo y la calidad del agua ha llevado a la necesidad de abordar la detección y remediación de contaminantes emergentes (CE) en aguas residuales y ambientes acuáticos. Estos CE, que son sustancias químicas sin estatus regulatorio, incluyen fármacos como antibióticos, analgésicos, β-bloqueadores, antidepresivos, productos de higiene y pesticidas, entre otros (doi.org/10.1002/celc.202200188). En este contexto, la presente investigación tiene como objetivo el desarrollo de sensores electroquímicos de grafeno inducidos por láser (LIG) para la detección y remediación de CE totales, se prepararon muestras en el laboratorio de amoxicilina, diclofenaco, ibuprofeno y glifosato. Para llevar a cabo este proceso de detección y remediación, se utilizó un método de sensado y electroremediación que involucra la oxidación avanzada de los CE, donde se cataliza por la oxidación electroquímica del sistema de referencia mono-electronico ferri/ferrocianuro $(Fe(CN)_6^{3-/4-})$ de potasio, en presencia de peróxido de hidrógeno (H_2O_2) en un buffer de fosfato salino (PBS) 0.1 mol L^{-1} pH 7.45. El mecanismo de detección y remediación (figura 1.A), fue propuesto tras estudiar el proceso de oxidación avanzada mediante Voltametría Cíclica mostrado en la figura 1.B, donde se observa que la presencia de iones Fe^{+2}/Fe^{+3} cataliza la oxidación de los CE a menores potenciales, lo que se traduce en mayores corrientes de oxidación. La Figura 1.C muestra la curva de calibración en un rango lineal de 50 a 500 ng mL^{-1} (ppb) para diferentes CE, mostrando una dependencia lineal entre la concentración y la respuesta de corriente, con coeficientes de correlación >0.99 y LOD de 76.7 ppb. Este trabajo representa un significativo avance en el campo de la detección y remediación de contaminantes emergentes totales en aguas. La utilización de electrodos LIG ha demostrado ser efectiva en la detección precisa de diversos CE y la posterior remediación electroquímica, con respecto a sus homologas como la cromatografía líquida acoplada a masas, lo que podría contribuir a la mejora de la calidad de vida al mitigar los efectos negativos de estos contaminantes en la salud humana, animal y vegetal, así como en el medio ambiente en general.

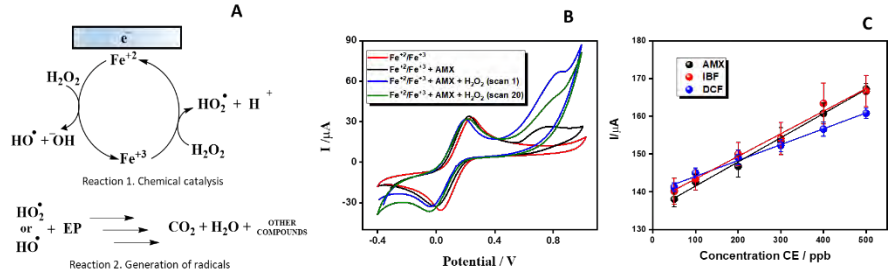


Figura 1. *Detección y remediación de CE. A) Mecanismo de detección y remediación electroquímica. B) Voltametría cíclica de Fe^{+2}/Fe^{+3} 2.0 mmol L^{-1} y Gly 100 ppm + Fe^{+2}/Fe^{+3} + H_2O_2 80 mmol L^{-1}. B) Curva de calibración de CE en rango lineal de 50 a 500 ppb, mediante cronoamperometría.*

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Gloria Crespo agradece al Programa Jóvenes Investigadores e Innovadores en las regiones para atención de demandas definidas por los CODECTI de los Departamentos de Chocó, Valle del Cauca, Cauca y Nariño-BPIN 2022000100068, de Minciencias. Gloria Crespo y Drochss Valencia agradecen el apoyo al CYTED por el financiamiento del proyecto Contaminantes Emergentes en Aguas Residuales: Innovación para la Detección y Eliminación (CRARAL). Todos los autores agradecen el apoyo de la convocatoria multicampus de la pontificia universidad Javeriana.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VI-215-O ***DESARROLLO DE DISPERSIONES ACUOSAS DE POLIURETANO CON POTENCIAL APLICACIÓN EN LA INDUSTRIA DE TEXTILES RECUBIERTOS***

Desarrollo de Dispersiones Acuosas de Poliuretano con Potencial Aplicación en la Industria de Textiles Recubiertos

Juliana Lasprilla-Botero [a]*, Mayka Bautista [a], Mauricio Acelas [a], Víctor H. Orozco[b], Luis F. Giraldo[b] *

[a] *Grupo de Investigación en Polímeros y Recubrimientos Textiles (GINPRETEX), Proquinal S.A.S, Bogotá-Colombia*
[b] *Laboratorio de Investigación en Polímeros (LIPOL), Instituto de Química, Universidad de Antioquia, Medellín-Colombia*
** Autor de correspondencia: luis.giraldo2@udea.edu.co; juliana.lasprilla@spradling.group*

Palabras Claves: Dispersiones acuosas de poliuretano; recubrimientos textiles; VOCs, síntesis, recubrimiento por transferencia.

Las dispersiones acuosas de poliuretano (PUD) continúan siendo uno de los materiales más prometedores para reemplazar los sistemas de poliuretano base solvente utilizados en la industria de recubrimientos y adhesivos. Debido a las restricciones ambientales, la mayoría de las formulaciones que usan compuestos orgánicos volátiles deben cambiarse a su contraparte base agua. Si bien los recubrimientos elaborados con poliuretano muestran buena resistencia a la tracción y resiliencia, es necesario ajustar las propiedades térmicas, tribológicas y adhesivas para su uso como recubrimientos en la fabricación de cuero sintético. En este sentido, las dispersiones acuosas de poliuretano entrecruzadas han surgido como una alternativa prometedora, no solo para mejorar las propiedades fisicoquímicas como la resistencia al rayado, la tensión de tracción y la hidrofobicidad, sino también para hacer que el proceso de producción y aplicación de poliuretanos sea más económico y ambientalmente amigable. El entrecruzamiento entre las cadenas poliméricas de poliuretano es fundamental para lograr recubrimientos textiles de alto desempeño.

En este trabajo se llevó a cabo la preparación de dispersiones acuosas de poliuretano mediante polimerización en pasos empleando el método del prepolímero a escala piloto, a partir de diisocianato de isoforona y poli(óxido de tetrametileno). Para llevar a cabo la dispersión del polímero en agua se empleó el ácido dimetilol propiónico como emulsificante interno. Los resultados de caracterización coloidal obtenidos confirman dispersiones acuosas poliméricas muy estables con un potencial $\zeta\zeta$ de -61± 3 mV y un tamaño de partícula promedio de 90 nm.

La aplicación de estas dispersiones en las capas superiores (*skin* y *topcoat*) de los prototipos de cuero sintético (ver **Figura 1**), fueron realizadas en una recubridora a nivel de laboratorio por parte de Proquinal S.A.S. Los resultados mostraron la formación de recubrimientos uniformes, cuyas propiedades fueron considerablemente mejoradas por la incorporación de agentes entrecruzantes. Además, los resultados de los análisis tribológicos y de desempeño exhibieron resultados prometedores para la producción de cuero sintético a escala industrial, impulsando así la industria química nacional.

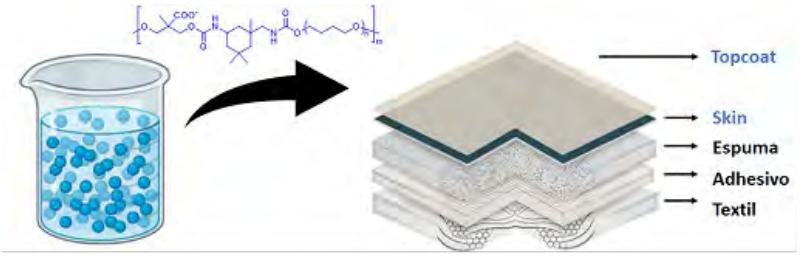


Figura 1. Esquema de aplicación de PUD en la elaboración de un producto multicapa de cuero sintético.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VI-216-O APROVECHAMIENTO DE RESIDUOS DE CAÑA DE AZÚCAR POR CARBONIZACIÓN HIDROTERMAL: POTENCIAL USO DEL HIDROCARBÓN Y DEL SUBPRODUCTO LÍQUIDO

Aprovechamiento de Residuos de Caña de Azúcar por Carbonización Hidrotermal: Potencial Uso del Hidrocarbón y del Subproducto Líquido

Lyseth K. Gómez, Yolmer S. Acevedo, Jenny M. Vélez, Lina M. Orozco, Luz A. Veloza*

Grupo de investigación Polifenoles, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.
**lveloza@utp.edu.co*

Palabras Claves: Bagazo de caña de azúcar; Carbonización hidrotermal; Hidrocarbón; Fase acuosa; Actividades biológicas

Una de las tecnologías actuales utilizada para la valorización de la biomasa es el proceso termoquímico conocido como carbonización hidrotermal (HTC) que tiene como finalidad transformar el material de partida generando dos productos principales: un sólido conocido como hidrocarbón y una fase acuosa. Entre las aplicaciones se tiene como fertilizante, biorremediación de suelos, combustible sólido, entre otras. En el presente trabajo de investigación se utilizó bagazo de caña de azúcar como materia prima para llevar a cabo el proceso HTC. La humedad, la temperatura, y los tiempos de reacción utilizados oscilaron entre 50-85%, 190-250 °C y 2-4 h, respectivamente. Las propiedades fisicoquímicas del hidrocarbón son importantes para definir sus aplicaciones, por tanto, se caracterizaron mediante análisis próximo, elemental y se calculó el poder calorífico. A las fases acuosas obtenidas se les determinó la actividad fitoestimulante mediante germinación *in vitro* de *Lactuca sativa* y capacidad antioxidante por el método de DPPH. Además se cuantificó la cantidad de fenoles totales por el método Folin-Ciocalteu.

Los rendimientos de hidrocarbón y de las fases acuosas oscilaron entre 46-78% y no se dieron diferencias significativas con respecto al tiempo de reacción, sin embargo, el efecto de la temperatura fue en general inversamente proporcional al rendimiento. En cuanto a la caracterización del hidrocarbón, el contenido de material volátil y O disminuyeron en comparación con la materia prima, además, se observó un aumento en el carbón fijo y contenido de C, que favoreció el incremento del poder calorífico.

La evaluación de las actividades biológicas mostró que la fase acuosa tuvo un efecto fitoestimulante (IG>100%) en la germinación de semillas de *Lactuca sativa* cuando las reacciones se llevaron a cabo a temperaturas más altas. En relación con la actividad antioxidante, las fases acuosas presentaron una buena capacidad en la neutralización de radicales DPPH (38-215 µmol TE/100 mL), ésta se correlacionó en un 92% con el contenido de fenoles totales (808-2719 µg EAG/mL). En conclusión, los datos obtenidos muestran que el bagazo de caña de azúcar transformado a través del proceso HTC produce un hidrocarbón con posibles aplicaciones como fuente de energía y el agua de proceso como materia prima rica en compuestos antioxidantes.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VI-217-O VALORIZACIÓN DE RESIDUOS AGROINDUSTRIALES MEDIANTE CARBONIZACIÓN HIDROTERMAL: UN CAMINO HACIA UNA ECONOMÍA CIRCULAR

Valorización de Residuos Agroindustriales Mediante Carbonización Hidrotermal: Un Camino hacia una Economía Circular

Hugo A. López, Juan E. Gallego, Jenny M. Vélez, Lina M. Orozco, Luz A. Veloza*

Grupo de Investigación Polifenoles, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.
lveloza@utp.edu.co

Palabras Claves: Cáscara de plátano; Hidrocarbón; Agua de proceso; Carbonización hidrotermal; Actividades biológicas

La carbonización hidrotermal (HTC) es una técnica de conversión termoquímica novedosa que transforma biomasa húmeda en energía y productos químicos sin secado previo. Los principales productos obtenidos son: un sólido conocido como hidrocarbón y el agua de proceso, los cuales han mostrado tener diversas aplicaciones entre ellas enmienda del suelo, combustible sólido, captura de carbono, entre otras. En el desarrollo del presente trabajo se han obtenido hidrocarbones y sus respectivas aguas de proceso mediante HTC utilizando cáscara de plátano como materia prima. El proceso se llevó a cabo bajo diferentes condiciones de humedad (50-85%), temperatura (150-230 °C) y tiempo de residencia (2-4 h).

Los hidrocarbones obtenidos han sido caracterizados mediante análisis próximo, elemental y poder calorífico. Respecto al agua de proceso se evaluó la fitoestimulación mediante germinación *in vitro* de semillas de *Lactuca sativa* y la capacidad antioxidante por el método de DPPH; adicionalmente, se determinó el contenido de fenoles totales por el método de Folin-Ciocalteu. Los resultados mostraron que el rendimiento del producto sólido disminuyó conforme aumentó la temperatura y la humedad, oscilando entre 20-80%, para el agua de proceso el rendimiento fue mayor cuando se incrementó la temperatura, con valores entre 11-66%. La caracterización de los hidrocarbones obtenidos 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.

La evaluación de las actividades biológicas indicó que el agua de proceso es fitoestimulante (GI >100%) en la germinación de semillas de *Lactuca sativa* cuando se realizan las reacciones a bajas temperaturas. Respecto a la actividad antioxidante, las fases acuosas presentaron una alta capacidad de neutralización de radicales DPPH (115-440 µmol TE/100 mL), esta actividad estuvo relacionada en un 70% con el contenido de fenoles totales (780-4500 µg EA/mL). Los resultados obtenidos muestran que la HTC es un proceso prometedor para la obtención de productos de alto valor agregado, que podrían ser empleados en la generación de energía y compuestos plataforma con diversas aplicaciones.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VI-219-O SENSORES BASADOS EN GRAFENO INDUCIDO POR LÁSER PARA LA MEDICIÓN DE GASES DE EFECTO INVERNADERO (GEI)

Sensores Basados en Grafeno Inducido Por Láser para la Medición de Gases de Efecto Invernadero (GEI)

María, F. Hernández-Rodríguez [a], **Ana, K. Díaz-Duran** [a], **Andres Jaramillo-Botero** [a,b],* **Drochss Valencia-Ochoa** [a],*

[a] *Alianza Omicas, Pontificia Universidad Javeriana, Cali, Colombia*
[b] *Química e Ingeniería Química, Instituto de Tecnología de California, Pasadena, Estados Unidos*
* *Autores de correspondencia:* ajaramil@caltech.edu, drochss.valencia@javerianacali.edu.co

Palabras Claves: Gases de efecto invernadero; sensores de gas; electrodos de grafeno inducidos por láser; efecto Joule.

Actualmente, la medición precisa de gases de efecto invernadero (GEI) provenientes de diversas fuentes sigue siendo un desafío para los dispositivos portátiles de bajo costo. En este estudio, presentamos un avance significativo en el diseño y desarrollo de un sensor de GEI utilizando un filamento de grafeno inducido por láser (LIG), como se muestra en la Figura 1A. Para maximizar el rendimiento del sensor, se ajustaron parámetros clave en la fabricación de los electrodos LIG, tales como la distancia del filamento, la potencia del láser y la velocidad de impresión. Los resultados obtenidos demuestran que el sensor alcanza su máximo rendimiento con una distancia de 6.5 mm entre los terminales de los electrodos, aplicando una potencia láser de 4.05 W y una velocidad de trazado de 6.0 cm s^{-1}. Estas condiciones de impresión brindan una sensibilidad óptima, una mejor resolución y los límites de detección (LOD) y cuantificación (LOQ) más bajos. El principio de cuantificación de los GEI se basa en la medición del cambio en la resistencia eléctrica del LIG producto de la adsorción de las moléculas del GEI, favorecido por calentamiento de Joule. Para realizar estas mediciones, se aplicó una diferencia de potencial entre los dos terminales del sensor LIG y se midió la corriente en función del tiempo en diversas condiciones de trabajo. A partir del potencial aplicado y la corriente medida, se calculó la resistencia del medio (R) utilizando la ley de Ohm. Esta resistencia se normalizó con respecto a un gas de referencia (R_0) y se expresó na relación porcentual NR (NR= R− R0R0×100%NR= R− R0R0×100%), como se muestra en la Figura 1B y C. El sensor desarrollado presenta una relación lineal entre la resistencia normalizada y la concentración de varios GEI, como el N_2O, el dióxido de carbono (CO_2) y el metano (CH_4), en concentraciones del orden de partes por millón (ppm), desde 2.0 hasta 130 ppm. Además, se logró una sensibilidad de -2.36[N2O]N2O±0.14 ppb^{-1}. Esta investigación ofrece una metodología novedosa y costo-eficiente para la medición de GEI y resalta el potencial de los sensores LIG para aplicaciones en la detección de GEI en diferentes aplicaciones.

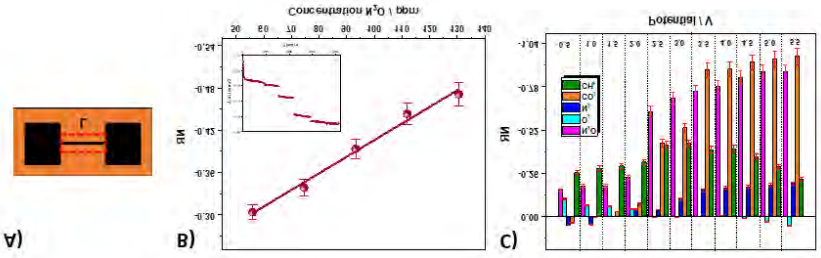


Figura 1. Sensor de gases de efecto invernadero: A) Diseño del sensor. B) Curva de calibración del N_2O a una concentración de 50 a 130 ppm. C) Respuesta de diferentes gases; O_2, N_2, CH_4, CO_2 y N_2O a diferentes potenciales.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VI-311-O ***DESARROLLO METODOLÓGICO PARA OBTENER UN MATERIAL DE REFERENCIA "IN-HOUSE" DE COCAÍNA PARA APLICACIONES FORENSES EN EL MARCO DE LOS ODS***

Desarrollo Metodológico para Obtener un Material de Referencia *"in-house"* de Cocaína para Aplicaciones Forenses en el Marco de los ODS

Natalie Álvarez [a*], **William F. Garzón** [b], **Sandra E. Melo** [c], **Diego Ballesteros** [d], **Luis I. Rodríguez** [a]

[a] *Grupo de investigación en Química de Alimentos, Universidad Nacional de Colombia, Colombia.*
[b] *Grupo de investigación en Drogas de Abuso, Fiscalía General de la Nación, Colombia.*
[c] *Departamento de Agronomía, Universidad Nacional de Colombia, Colombia.*
[d] *Grupo Alimentos, Nutrición y Salud, Pontificia Universidad Javeriana, Colombia*

[*] *Autor de correspondencia: naalvarezal@unal.edu.co*

Palabras clave: cocaína; material de referencia; extracción con fluidos supercríticos; extracción con líquidos presurizados; diseño experimental.

Se desarrolló una metodología para obtener un material de referencia *"in-house"* (RM*ih*) de cocaína a partir de una muestra incautada, teniendo en cuenta diferentes lineamientos internacionales, así como los principios de la Química Verde y los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS). Para llevar a cabo esto, se evaluaron procedimientos de extracción y purificación como (i) cromatografía en columna (CC) y (ii) una estrategia secuencial de extracción con fluidos supercríticos (SFE)-extracción con líquidos presurizados (PLE). Asimismo, se emplearon los parámetros de solubilidad de Hansen (HSP), con el fin de seleccionar el mejor disolvente verde a emplear en PLE. Por otro lado, se realizó la caracterización tanto del material de partida, como del material obtenido en las diferentes técnicas de extracción y purificación mencionadas, mediante GC-MS y GC-FID. Teniendo en cuenta lo anterior, se evaluaron diseños experimentales para determinar las condiciones óptimas de trabajo a emplear en PLE, siendo la variable respuesta la pureza del analito. Finalmente, se obtuvo el candidato a RM*ih* de la cocaína.

La muestra incautada contenía 81,29% de cocaína. Por CC (fase móvil correspondiente a cloroformo-metanol (6:1)) se logró obtener el analito con una pureza del 96,35%. Por otro lado, empleando la estimación de los HSP para la cocaína, se determinó que el disolvente más adecuado para emplear en PLE era el acetato de etilo (EtOAc). La estrategia secuencial ambientalmente amigable SFE-PLE (empleando como disolventes CO_2 supercrítico y EtOAc, respectivamente) permitió obtener el analito con una pureza del 91,13%. El candidato a RM*ih* se preparó a partir de la estrategia que empleó disolventes verdes, lo cual está enmarcado en los principios de la Química Verde y los ODS.

Agradecimientos: Los autores agradecen a la *Red BioR DEI* de la Universidad Nacional de Colombia (HERMES 57909).

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VI-401-O ***HETEROGENIZACIÓN DE A−CIANOFENILENVINILENO EN NANOTUBOS DE TIO2 PARA LA FOTODEGRADACIÓN DE ÍNDIGO CARMÍN CON LUZ VISIBLE***

Heterogenización de α−cianofenilenvinileno en nanotubos de TiO_2 para la fotodegradación de Índigo Carmín con luz visible

Carlos F. Martínez [a, b], Marianny Y. Combariza [a], Nelson J. Castellanos [c], César A. Sierra [*b]

[a] *Grupo de Estudios e Investigaciones Ambientales (CEIAM), Escuela de Química, Universidad Industrial de Santander, Colombia*

[b] *Grupo de Investigación en Macromoléculas, Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia*

[c] *Laboratorio de Diseño y Reactividad de Estructuras Sólidas (Lab-DRES, 125), Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia*

* *Autor de correspondencia:* casierraa@unal.edu.co

Palabras Claves: α−Cianofenilenvinileno; nanotubos de TiO_2; Fotocatálisis heterogénea; Índigo Carmín.

En este trabajo se sintetizó y caracterizó el ácido 4,4'-((1Z,1'Z)-1,4-fenilene bis(2-cianoeten-2,1-diyl)) dibenzoico (α-CNFV), el cual se inmovilizó químicamente sobre la superficie de TiO_2 P-25 como soporte comercial y también sobre nanotubos (NT) de TiO_2 previamente sintetizados. Los sistemas híbridos α-CNFV/TiO_2 P-25 y α-CNFV/TiO_2-NT fueron caracterizados por espectroscopía UV-Vis, infrarroja, Raman, y termogravimetría, y sus propiedades texturales fueron estudiadas empleando isotermas de adsorción de N_2. La evaluación de su actividad como fotocatalizador heterogéneo se estudió en la degradación del contaminante Índigo Carmín (IC) empleando O_2 molecular y luz visible bajo condiciones ambientales de presión y temperatura (Figura 1). Los resultados obtenidos permitieron observar que sistema libre α-CNFV degrada únicamente 10% del contaminante al cabo de 60 minutos de exposición, mientras que los sistemas anclados α-CNFV/TiO_2 P-25 y α-CNFV/TiO_2-NT alcanzan un 35 y 42 % de degradación, respectivamente. Se demostró también que, al saturar el sistema de reacción con O_2 molecular se alcanza un 92 y 45 % de degradación, para cada uno de los sistemas FV-Ti, respectivamente. Por último, se estudió la estabilidad del sistema α-CNFV/TiO_2-NT en reacciones de reúso, demostrando que el sistema puede ser reutilizado durante al menos 5 ciclos de reacción.

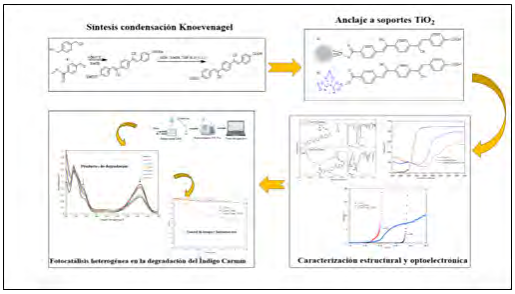


Figura 1. Metodología para el desarrollo de la investigación.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Valorización de Glicerol Organocatalizada por Carbenos N-Heterocíclicos (NHC)

Alexander Cárdenas,[a] Carolina Blanco,[a] Edwin A. Baquero*[a]

[a] *Estado Sólido y Catálisis Ambiental (ESCA), Universidad Nacional de Colombia - Sede Bogotá, Colombia.*
** Autor de correspondencia: eabaquerov@unal.edu.co*

Palabras Claves: Glicerol; Valorización; Organocatálisis; Carbenos N-Heterocíclicos; Carbonato de Glicerol.

La valorización de glicerol ha adquirido gran importancia en los últimos años, debido a que es un subproducto de la síntesis de biodiesel que se obtiene en grandes cantidades acumulándose como un residuo de la industria. Es por esto que su aprovechamiento resulta ser valioso ya que es una molécula versátil para la obtención de productos de valor agregado como el carbonato de glicerol (CG). Para lograr esto, se ha demostrado la necesidad de emplear catalizadores que sean capaces de acelerar el proceso de transesterificación de glicerol con carbonatos orgánicos, por ejemplo. En este sentido, los Carbenos N-heterocíclico (NHC) son moléculas que han adquirido alta relevancia en la catálisis debido a sus propiedades estereoelectrónicas únicas. Estos son capaces de estabilizar especies catalíticas metálicas confiriéndoles mejores actividades. Asimismo, han demostrado ser organocatalizadores versátiles debido a su gran nucleofilia capaces de activar moléculas inertes. Sin embargo, es de resaltar que el uso de NHCs como catalizadores para la valorización de glicerol se encuentra poco explorado. En este trabajo, se presenta el uso de diferentes sales de imidazolio con sustituyentes aromáticos como precursoras de los NHCs como organocatalizadores en el proceso de transesterificación de glicerol con dimetilcarbonato (DMC) para la obtención de CG (Figura 1). Para ello, se optimizaron las condiciones de la reacción (carga de catalizador, temperatura, tiempo, base, tipo de base, razón molar glicerol:DMC) y se evaluó la actividad catalítica de siete NHCs mediante RMN y cromatografía de gases.

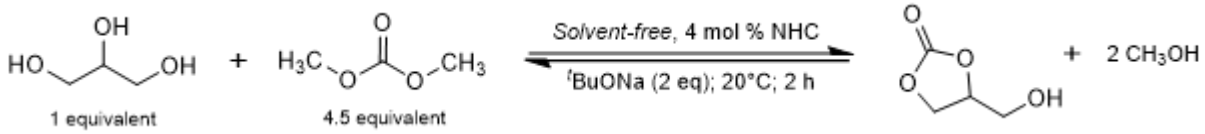


Figura 1. Reacción general para la conversión de glicerol en carbonato de glicerol utilizando NHCs como organocatalizadores.

Los resultados demuestran que los NHCs empleados son organocatalizadores eficientes en el proceso, ya que operan en condiciones libre de disolvente, a temperatura ambiente, bajas cargas de catalizador (hasta 2 mol%), 2 h de reacción y usando *tert* butóxido de sodio (2 eq) como base. Esto permitió obtener rendimientos de CG hasta del 100 %. Interesantemente, los mejores catalizadores son capaces de convertir glicerol crudo en CG hasta en un 45% bajo las condiciones optimizadas de reacción. Adicionalmente, resultados preliminares del estudio del mecanismo de la reacción serán también presentados.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

PRESENTACIONES MODALIDAD POSTER

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

BIOQUÍMICA Y TECNOLOGÍA

VII-6-P DESARROLLO IMPLEMENTACIÓN Y ARQUITECTURA DE ANSEP

Desarrollo Implementación y Arquitectura de ANSEP

Janeth G [a], Andrés P [b], María A A [a], María C C[a]*

[a] *Laboratorio de Bioquímica computacional y estructural Universidad Javeriana*
[b] *Laboratorio de Bioinformática y Biología de sistemas Universidad Nacional*
**Autor de correspondencia :* *mc.castrillon@javeriana.edu.co*

Palabras clave: Computational model; astrocytes; system Biology; neurodegenerative diseases.

Las enfermedades neurodegenerativas (ND) son enfermedades multifactoriales complejas. En los últimos años, su estudio ha crecido con fuerza, sin embargo, aún existen vacíos en el análisis del metabolismo alterado. Los enfoques clásicos han proporcionado información útil, pero limitada. Por lo que se hace necesario el uso de la biología de sistemas (SB). Linghu, et al, construyeron una red de enlace funcional para priorizar nuevos genes asociados con 110 enfermedades, divididos en 21 clases. Goh y colaboradores, combinaron la red de enfermedades humanas y la red de genes de enfermedades para crear una visión global con el propósito de explorar en un solo marco todo fenotipo conocido y asociaciones enfermedad-gen. Nguyen et al, desarrollaron un método computacional basado en la red de interacción proteína-proteína de nueve ND, para estudiar los vínculos entre estos. Santiago, Scherzer y Potashkin realizaron un análisis de red de las vías biológicas comunes entre el Parkinson y la diabetes tipo 2. Por último, Santiago y Potashkin aplicaron un metanálisis basado en redes para identificar biomarcadores para la enfermedad de Parkinson.

Por otro lado, los modelos metabólicos a escala del genoma son una herramienta poderosa para predecir el estado de la red en diferentes escenarios. Por ejemplo, la investigación de Stempler, Yizkah y Ruppin integra datos transcriptómicos de pacientes con Alzheimer reconociendo el succinato y prostaglandina D2 como biomarcador metabólico.

Pese a la importancia de esta perspectiva, la aplicación de la SB puede ser un factor limitante para los usuarios que no tienen habilidades en informática. Por esa razón, la creación de ANSEP es un esfuerzo para superar estas limitaciones con una interfaz gráfica fácil de usar donde se puede operar modelos metabólicos de neuronas y astrocitos, estudiando las ND desde un enfoque holístico.

En conclusión, ANSEP es una plataforma web amigable que permite simular diferentes condiciones metabólicas de neuronas y astrocitos en un contexto neurodegenerativo. Permitiendo a los usuarios realizar los análisis, sin programar, disminuyendo la curva de aprendizaje y promoviendo el uso de herramientas computacionales para el estudio de ND.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-7-P ***BIODEGRADACIÓN DE POLIURETANO MEDIANTE EL EXTRACTO ENZIMÁTICO DE ASPERGILLUS NIGER CMPUJ:H002 EN MEDIO SÓLIDO***

Biodegradación de Poliuretano mediante el Extracto Enzimático de Aspergillus Niger CMPUJ:H002 en Medio Sólido

Laura C Argüello [a*], **Daniela F Villamil** [a], **David L Sotelo** [a].

a. *Fundación Universidad de América, Colombia*

** Autor de correspondencia: laura.arguello@estudiantes.uamerica.edu.co*

Palabras Claves: Microorganismo; Aspergillus niger; Degradación; Enzimas; Poliuretano

El Poliuretano (PU) es un polímero termoplástico ampliamente utilizado en diversas industrias debido a sus propiedades flexibles, resistentes y aislantes, asimismo, ha contribuido durante los últimos años en el aumento exponencial de desechos plásticos, en el año 2015 representó el 6% (16 millones de toneladas) de los desechos globales de plásticos primarios. Esto sumado a la alta resistencia a la degradación que lo caracteriza, ha ocasionado impactos ambientales negativos como contaminación de suelos, aire y riesgos de incendios.

Teniendo en cuenta lo anterior y como estrategia innovadora, este estudio tiene como objetivo evaluar la degradación del PU mediante un extracto enzimático proveniente de un cultivo en medio sólido de *Aspergillus niger*, con la intención de contribuir en los avances científicos que buscan como finalidad convertir este tipo de desechos en materiales más simples y menos contaminantes.

Para obtener el extracto enzimático, se llevará a cabo la activación de la cepa en medio sólido haciendo uso de agar Sabourad Dextrosa y glucosa, después de un periodo de incubación de 8 días para permitir el crecimiento del hongo, se realizará una caracterización macroscópica y microscópica del mismo. Posteriormente se obtendrá el extracto enzimático crudo mediante extracción mecánica y se someterá a centrifugación con el fin de obtener un producto más concentrado. Para cuantificar la cantidad de proteína obtenida en el extracto, se realizará una curva de calibración de albúmina mediante espectrofotometría UV-Vis empleando el método Biuret y se llevará a cabo una prueba de electroforesis para confirmar la presencia de enzimas con potencial para la degradación del PU.

Después de un pretratamiento a las láminas de PU con radiación UV durante 1 mes, se realizarán ensayos donde las láminas estarán expuestas a diferentes concentraciones del extracto enzimático durante 8 semanas. Finalmente, se cuantificará la degradación de las láminas mediante análisis de pérdida de peso y microscopia electrónica de barrido (SEM).

Se espera obtener un extracto enzimático crudo de alta actividad y rendimiento para lograr una degradación en el material mayor al 1.7%. La degradación de los polímeros depende en gran medida del tipo de enzimas secretadas por el microorganismo, ya que estas desramificaran y degradaran el polímero.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-9-P ***APROXIMACIÓN METABOLÓMICA APLICADA AL EFECTO DEL ACEITE ESENCIAL DE LIPPIA ORIGANOIDES SOBRE LA FORMACIÓN DEL BIOFILM DE STAPHYLOCOCCUS AUREUS ATCC 43300.***

Aproximación Metabolómica Aplicada al Efecto del Aceite Esencial de *Lippia origanoides* sobre la Formación del *biofilm* de *Staphylococcus aureus* ATCC 43300.

Yurley T. Rojas [a], William Hidalgo[a]*, Marlon Y. Cáceres[a]

[a] Grupo de investigación en Bioquímica y Microbiología, Universidad industrial de Santander, Colombia

*William Hidalgo: whidalgo@uis.edu.co

Palabras clave: Vías metabólicas, *Anti-biofilm*; UHPLC-MS, metabolitos secundarios, antimicrobianos.

Staphylococcus aureus es un patógeno multirresistente responsable de un amplio espectro de infecciones intrahospitalarias, se ha asociado con un elevado índice de infecciones en dispositivos médicos gracias a su capacidad de formar *biofilm*. Por esta razón, el estudio del metabolismo durante la formación del *biofilm* de *S.aureus* en presencia de un antibiótico o agente antimicrobiano, puede mejorar nuestra compresión de las vías de acción de estos y del metabolismo adaptativo de *S.aureus*. En este estudio, con el objetivo de evaluar la actividad del aceite esencial (AE) de *Lippia origanoides* (LOT II) sobre las vías metabólicas que están involucradas durante la formación del *biofilm* de *S.aureus*, se evaluó la actividad *anti-biofilm* y los cambios metabólicos ocurridos por efecto del AE mediante el estudio de metabolómica no dirigida. Para evaluar la actividad *anti-biofilm*, se usó el método semicuantitativo de tinción de cristal violeta, donde se cuantifico la biomasa del *biofilm* con concentraciones entre 50 y 150µg/ml del AE. Asimismo, para el estudio de metabolómica, se hizo la extracción de los metabolitos durante la formación del *biofilm* en presencia del AE a 125µg/ml. Posteriormente, se analizaron por UHPLC-ESI-Orbitrap-HRMS. Para el procesamiento y análisis de los datos, se utilizaron los programas XCMS, MetaboAnalyst y Xcalibur. La identificación putativa de metabolitos se realizó por el software online CEU mass mediator junto con la base de datos MassBank, HMDB, Metlin y Pubchem. Los resultados mostraron que, el AE en concentración de 125µg/ml inhibió más del 50% del *biofilm*. Además, se observó alteraciones en el metabolismo de *S.aureus* cuya principal vía afectada fue el metabolismo de aminoácidos (Tabla 1). De igual forma, se encontró alteración en la vía de las pentosas fosfato, y en el metabolismo de los ácidos 2-oxocarboxilicos. En conclusión, el aceite esencial de *Lippia origanoides* es una estrategia antibacteriana que actúa como *anti-biofilm* en *S.aureus*, afectando las funciones biológicas relacionadas con el metabolismo de los aminoácidos y otras vías metabólicas importantes para el desarrollo del *biofilm*.

Tabla 1. Vías metabólicas con los metabolitos putativamente identificados.

Vías metabólicas	Metabolitos putativos
Metabolismo arginina y prolina	Creatina, Creatinina, 4-Hidroxicinamalagillagmatina, Ácido L-argininosuccínico
Metabolismo de β-alanina	Dihidrouracilo, β-Alanil-L-arginina

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-10-P ***EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DEL HONGO ENDÓFITO XYLARIA GUIANENSIS (XYLARIACEA)***

Evaluación De la Actividad Antioxidante Del Hongo Endófito *Xylaria guianensis* (Xylariacea)

Brigith Y Cardona [a*], Oscar M Mosquera [b], Jaime A Martínez [c]

[a] *Grupo de Investigación de Biotecnología-Productos Naturales, Escuela de Tecnología Química, Facultad de Tecnología, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia*

* *Autor de correspondencia: brigith.cardona@utp.edu.co*

Palabras Claves: Compuestos fenólicos; fermentación; hongos endófitos.

Los hongos endófitos viven en la mayoría de los tejidos de plantas y estos tienen la capacidad de producir metabolitos secundarios novedosos[1]; en el caso de los hongos endófitos de la familia Xylariacea, tienen la capacidad de biosintetizar metabolitos secundarios con actividades biológicas como: antibacteriana, antifúngica y antioxidante[2]. Por otra parte, el estrés oxidativo se da por un desequilibrio en las especies reactivas de oxígeno y nitrógeno, lo que genera radicales libres y posterior daño a nivel celular[3]. El objetivo de este estudio fue encontrar el potencial antioxidante del extracto del hongo endófito *Xylaria guianensis;* para ello, se realizó un proceso de fermentación con levadura y glucosa, seguido de una extracción líquido-líquido con acetato de etilo y concentración del extracto. Con el extracto de *X. guianensis* se determinó la presencia o ausencia de compuestos fenólicos por cromatografía en capa delgada (CCD). Posteriormente, se determinó la actividad antioxidante por los métodos: evaluación de la técnica 2,2-difenil-I-picrilhidrazilo (DPPH*), evaluación de la capacidad del potencial reductor férrico (FRAP) y evaluación de la capacidad antioxidante total (CAT); además, se evaluó el contenido total de fenoles por el método Folin-Ciocalteu. Los resultados mostraron que extracto de *X. guianensis* presenta una intensidad de señal alta para compuestos fenólicos por CCD; en cuanto a la actividad antioxidante por el método DPPH* se obtuvo 2,136 µg Trolox/mg extracto, por el método FRAP no se mostró actividad antioxidante significativa, por CAT se obtuvo 403,171 µg ácido gálico/mg extracto, y el contenido de fenoles totales dio como resultado 26,131 µg ácido gálico/mg extracto. Se puede concluir que el extracto del hongo endófito tiene compuestos que presentan mayor actividad en cuanto a la formación de complejos como los vistos en el método de CAT, esto resalta su posible potencial como un agente antioxidante; además, los resultados mostrados por CCD y fenoles totales dejan ver que el extracto tiene compuestos fenólicos de interés que se pueden relacionar a la actividad biológica estudiada.

Referencias

1. Ujam NT, Ajaghaku DL, Okoye FBC, Esimone CO. Antioxidant and immunosuppressive activities of extracts of endophytic fungi isolated from Psidium guajava and Newbouldia laevis. Phytomedicine Plus. 2021 May 1;1(2).
2. Macías-Rubalcava ML, Sánchez-Fernández RE. Secondary metabolites of endophytic Xylaria species with potential applications in medicine and agriculture. Vol. 33, World Journal of Microbiology and Biotechnology. Springer Netherlands; 2017.
3. Bedard K, Krause KH. The NOX family of ROS-generating NADPH oxidases: Physiology and pathophysiology. Physiol Rev. 2007;87(1):245–313.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-11-P APLICACIÓN DE METABOLÓMICA EN EL ESTUDIO DEL EFECTO DEL ACEITE ESENCIAL LIPPIA ORIGANOIDES SOBRE STAPHYLOCOCCUS AUREUS EN ESTADO PLANCTÓNICO

Aplicación de Metabolómica en el Estudio del Efecto del Aceite Esencial *Lippia origanoides* sobre *Staphylococcus aureus* en Estado Planctónico

Zaireth L. García[a], Marlon Y. Cáceres[a] ,William Hidalgo[a*]

[a]Grupo de investigación en bioquímica y microbiología, Universidad Industrial de Santander, Colombia
**Autor de correspondencia: whidalgo@uis.edu.co*

Palabras claves: Metabolómica no dirigida; bacterias patógenas; antimicrobianos de origen vegetal; mecanismo de acción; metabolitos.

El desconocimiento del mecanismo de acción por el cual los aceites esenciales (AE) ejercen su actividad biológica sobre ciertos microorganismos es, actualmente, un desafío que se puede abordar a través de las ciencias ómicas. Entre éstas, la metabolómica es una estrategia poderosa puesto que permite rastrear los cambios metabólicos que ocurren en un sistema biológico a causa del efecto de moléculas bioactivas de origen vegetal. Por tanto, a través de una aproximación quimiométrica basada en LC-MS, la presente investigación exploró el posible mecanismo de acción por el cual el aceite esencial de *Lippia origanoides* (LOT II) ejerce su efecto biológico sobre *Staphylococcus aureus*. La concentración mínima inhibitoria (CMI) del AE se determinó a través del método microdilución en caldo (Chen et al., 2020). La extracción de metabolitos se llevó a cabo utilizando el método reportado por Zhou (Zhou et al., 2019). Las muestras fueron procesadas mediante UHPLC-HRMS y los datos analizados a través de estadística uni- y multivariada. La identificación de los metabolitos diferenciales se llevó a cabo por comparación de los espectros de masas con los reportados en la literatura y en bases de datos como MassBank, HMDB, Metlin y Pubchem. Un enriquecimiento de vías se llevó a cabo para determinar las rutas metabólicas afectadas por el AE. Para el AE se determinó una CMI de 0,75 mg/mL sobre S.aureus. El análisis metabolómico permitió identificar que los metabolitos tetrahydrobiopterin, ácido D-aspártico, ácido D-glutámico, fueron los más relevantes entre las muestras, sugiriendo que el AE ejerce su acción biológica a través de la inhibición o alteración de las rutas biosintéticas implicadas en el metabolismo de aminoácidos como lo es el metabolismo de la arginina y la prolina o rutas como el metabolismo del glutamato.

Referencias bibliográficas

Chen, J., Tang, C., Zhang, R., Ye, S., Zhao, Z., Huang, Y., Xu, X., Lan, W., & Yang, D. (2020). Metabolomics analysis to evaluate the antibacterial activity of the essential oil from the leaves of Cinnamomum camphora (Linn.) Presl. *Journal of Ethnopharmacology*, *253*, 112652. https://doi.org/10.1016/J.JEP.2020.112652

Zhou, J. W., Muhammad, J., Sun, B., Yang, R., Wadood, A., Wang, J. S., & Jia, A. Q. (2019). Metabolomic analysis of quorum sensing inhibitor hordenine on Pseudomonas aeruginosa. *Applied Microbiology and Biotechnology*, *103*(15), 6271–6285. https://doi.org/10.1007/S00253-019-09878-W/METRICS

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-12-P ***CARACTERIZACIÓN BIOQUÍMICA Y MORFOLÓGICA DE POBLACIONES DE PALMA DE IRACA (GÉNERO CARLUDOVICA) CULTIVADA EN DIFERENTES LOCALIDADES COLOMBIANAS***

Caracterización Bioquímica y Morfológica de Poblaciones de Palma de Iraca (Género *Carludovica)* Cultivada en Diferentes Localidades Colombianas

Dayana L Jiménez [a]*, Juan C Zambrano[a], Jesús A Romo[a]

a Grupo de Investigación en Bioquímica y Estudios Genéticos - BIOGEN, Universidad de Nariño, Colombia
** Autor de correspondencia: lorejimenez@udenar.edu.co*

Palabras Claves: *Carludovica;* Aloenzima; polimorfismo; fenotipo; genotipo.

La palma de iraca es una planta perteneciente a la familia *Cyclanthaceae* que crece en diferentes regiones de Colombia y se usa principalmente como materia prima para la manufactura de artesanías. El objetivo de este estudio fue determinar la variabilidad de tres subpoblaciones de palma de iraca colombiana usando aloenzimas y descriptores morfológicos. Para ello se evaluaron las subpoblaciones provenientes de: Medellín (MED), Mocoa (MOC) y Linares (LIN), establecidas en el Departamento de Nariño. Dentro de la población de LIN se evaluaron ocho subpoblaciones (CHOC, GUA, NAC, POR, MIN, LLG, LAG y CHUP). La evaluación de caracteres morfológicos se realizó usando 20 variables cuantitativas, encontrándose a la subpoblación MED como la más discriminante y sobresaliente en la mayoría de estas. Por otra parte, el análisis de aloenzimas se realizó mediante la técnica conocida como Electroforesis de Enzimas Multilocus (MLEE), para cuatro sistemas enzimáticos: Superóxido dismutasa (SOD), Malato deshidrogenasa (MDH), Alcohol deshidrogenasa (ADH) y Peroxidasa (PER), en un total de 61 individuos de palma de iraca. Todos los loci analizados fueron polimórficos, estos exhibieron un polimorfismo general de 57,5% lo que conllevó a que la variabilidad genética promedio entre los individuos fuera moderada. Se pudo detectar la existencia de variabilidad genética dentro de las poblaciones, destacándose las enzimas MDH y ADH como las más polimórficas. Por otra parte, el análisis de distancias genéticas mediante la construcción de dendrogramas permitió mostrar a las subpoblaciones MED y MOC como las más diferenciadas respecto al resto de subpoblaciones evaluadas. La enzima MDH presentó una diversidad promedio de 0.495 siendo esta la más alta, mientras que la subpoblación con mayor diversidad genética fue LLG (h = 0.375). El valor de la diversidad genética media fue de 0.246 lo que indica que la tasa evolutiva de palma de iraca es baja, según los sistemas enzimáticos evaluados.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-13-P ***IDENTIFICACIÓN IN SILICO E IN VITRO DE SECUENCIAS DE ARNM CODIFICANTES PARA ENZIMAS DE LA FAMILIA CYP450 ASOCIADAS A LA PRODUCCIÓN DE TRITERPENOS PENTACÍCLICOS ÁCIDOS EN RAÍCES DE CECROPIA ANGUSTIFOLIA.***

Identificación *In Silico* e *In Vitro* de Secuencias de ARNm Codificantes para Enzimas de la Familia CYP450 Asociadas a la Producción de Triterpenos Pentacíclicos Ácidos en Raíces de *Cecropia angustifolia*.

Juan E. Vivas[a*], Adrián C. Rodríguez[b], Laura M. Rodríguez[b], Guillermo L. Montoya[b].

[a] *Maestría en Ciencias Biotecnología. Departamento de Ciencias Farmacéuticas Químicas, Universidad Icesi, Cali, Valle del Cauca, Colombia.*

[b] *Facultad de Ingeniería, Diseño y Ciencias Aplicadas. Escuela de Ciencias Aplicadas e Industria Sostenible. Universidad Icesi, Cali, Valle del Cauca, Colombia.*

** Autor de correspondencia:* juan.vivas3@u.icesi.edu.co

Palabras Claves: triterpenos pentacíclicos; enzimas CYP450; biotecnología vegetal; bioinformática.

Cecropia angustifolia es una planta nativa de la zona andina del continente americano, la cual se caracteriza por tener en sus raíces un gran contenido de triterpenos pentacíclicos ácidos, los cuales han demostrado tener un gran potencial terapéutico en la diabetes mellitus tipo II. No obstante, el aprovechamiento de estos metabolitos a partir de individuos silvestres supone un gran impacto ambiental, y el desarrollo de plataformas sostenibles, como los cultivos *in-vitro* de órganos vegetales, ha evidenciado una gran diferencia metabólica en la producción de estos metabolitos en comparación a los perfiles obtenidos a partir de material silvestre. Es por esto que, el presente proyecto tuvo como objetivo la identificación de los genes codificantes para las enzimas de la familia CYP450 asociadas a la producción de estos metabolitos en tejidos radiculares de *Cecropia angustifolia*. Para esto, se realizó un establecimiento bibliográfico de la ruta metabólica, identificando las familias de enzimas CYP716A, CYP716C, CYP72A y CYP71D como claves en el proceso de biogénesis. Posteriormente, se realizó una aproximación bioinformática, donde se ensambló un transcrito de una especie taxonómicamente cercana, y con ayuda de herramientas como BLAST y ClustalO se identificaron mensajeros candidatos que pudieran contener secuencias consenso, las cuales fueron empleadas para la identificación *in-vitro*. Se determinó que, esta aproximación permitió la identificación de algunos ARNm candidatos potenciales para enzimas relacionadas a esta ruta metabólica, confirmando la presencia de algunos de estos genes en el material vegetal empleado. No obstante, es necesario evaluar la identidad de los mensajeros encontrados, a fin de poder ser empleados para el desarrollo de análisis de expresión relativa o diferencial de las enzimas de interés.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-14-P ANÁLISIS CINÉTICO DE LA PRODUCCIÓN DE TRITERPENOS PENTACÍCLICOS DE UN CULTIVO DE RAÍCES DE CECROPIA ANGUSTIFOLIA EN UN SISTEMA DE INMERSIÓN

Análisis Cinético de la Producción de Triterpenos Pentacíclicos de un Cultivo de Raíces de *Cecropia angustifolia* en un Sistema de Inmersión

Andrea P. Melendez[a], Juan E. Vivas[b], *Guillermo L. Montoya[c]

[a]*Programa de Química Farmacéutica, Facultad de Ingeniería, Diseño y Ciencias Aplicadas. Escuela de Ciencias Aplicadas e Industria Sostenible. Universidad Icesi, Cali, Valle del Cauca, Colombia*
[b]*Maestría en Ciencias-Biotecnología. Departamento de Ciencias Farmacéuticas Químicas, Universidad Icesi, Cali, Valle del Cauca, Colombia.*
[c]*Facultad de Ingeniería, Diseño y Ciencias Aplicadas. Escuela de Ciencias Aplicadas e Industria Sostenible. Universidad Icesi, Cali, Valle del Cauca, Colombia*
** Autor de correspondencia: glmontoya@icesi.edu.co*

Palabras Claves: *Cecropia angustifolia;* Triterpenos pentacíclicos; Sistema de inmersión; Cinética de crecimiento

.

Investigaciones preclínicas realizadas por el grupo de investigación de Productos Naturales han demostrado la utilidad de los extractos de *Cecropia angustifolia* en la prevención y modulación de la diabetes tipo II debido a su alto contenido de triterpenos pentacíclicos (TPs). Por esta razón, se ha implementado el cultivo *in vitro* de raíces en sistemas de inmersión. No obstante, la productividad de TPs por unidad de biomasa obtenida mediante este sistema ha sido baja, lo que ha generado la necesidad de escalar el proceso a un biorreactor de mayor tamaño. Para lograr esto y optimizar su productividad, fue necesario reconocer la cinética de crecimiento, la cual hasta el momento no ha sido reportada. De este modo, el objetivo de este proyecto fue analizar la relación entre la producción de TPs y la cinética de crecimiento de un cultivo *in vitro* de raíces de *Cecropia angustifolia* en un sistema de inmersión. Para cumplir este objetivo, se establecieron cultivos de raíces en medio de cultivo líquido MS suplementado con glucosa al 3% y ácido indol butírico (IBA). Posteriormente, se monitoreó el crecimiento de las raíces mediante muestreos cada 3 días para medir el contenido de glucosa en el medio de cultivo, la biomasa fresca y seca, y el contenido de TPs en el material vegetal. Utilizando los datos recopilados, se logró establecer la cinética de producción de estos metabolitos y se construyó una curva de crecimiento donde se identificaron las fases de retraso, exponencial y estacionaria. Además, se estimaron parámetros cinéticos de crecimiento como el tiempo de duplicación, velocidad específica de crecimiento, la velocidad específica de consumo de glucosa y el coeficiente de rendimiento biomasa/glucosa. Los resultados obtenidos ofrecen información valiosa para el avance en el escalamiento de la producción de estos metabolitos en biorreactores y brindan la posibilidad de implementar estrategias para aumentar el rendimiento, como el uso de elicitores durante la fase estacionaria.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-15-P ***ANÁLISIS METABOLÓMICO DEL EFECTO DEL ACEITE ESENCIAL DE LIPPIA ORIGANOIDES SOBRE LA INHIBICIÓN DE PSEUDOMONAS AERUGINOSA***

Análisis Metabolómico del Efecto del Aceite Esencial de *Lippia origanoides* Sobre la Inhibición de *Pseudomonas aeruginosa*

María F. Arciniegas [a], * William Hidalgo [a], Marlon Y. Cáceres [a]

[a] *Grupo de Investigación en Bioquímica y Microbiología (GIBIM), Universidad Industrial de Santander, Colombia*

* *Autor de correspondencia: mafega1718@gmail.com*

Palabras clave: resistencia antimicrobiana**,** estado planctónico, metabolitos secundarios, alternativas antimicrobianas, rutas metabólicas

La resistencia a los antimicrobianos es un problema global que surgió desde el descubrimiento de los antibióticos debido a la capacidad que tienen los microorganismos de desarrollar resistencia como un proceso natural de su crecimiento. Esta resistencia a los agentes antimicrobianos ha ido en aumento a lo largo de los años, siendo el patógeno oportunista *Pseudomonas aeruginosa* (*P. aeruginosa*) una de las principales causas de las infecciones nosocomiales en la actualidad, causante de infecciones agudas y crónicas potencialmente mortales; por lo anterior, este microorganismo ha sido clasificado por la Organización Mundial de la Salud como una amenaza urgente para la salud pública. En consecuencia, la investigación en nuevas alternativas terapéuticas no antibióticas para combatir la resistencia a los antimicrobianos está en auge.

En esta investigación, se evaluó el efecto del aceite esencial (AE) de *Lippia origanoides* (*L. origanoides*) sobre el crecimiento y metabolismo de *P. aeruginosa* en estado planctónico. La concentración mínima inhibitoria (CMI) y concentración mínima bactericida (CMB) se determinaron mediante el método de dilución en caldo, y los análisis de metabolómica se realizaron mediante análisis por cromatografía líquida de alta eficiencia acoplada a espectrometría de masas de alta resolución (UHPLC-ESI-Orbitrap-HRMS). El AE inhibió el crecimiento de *P. aeruginosa* con una CMI de 0,3 mg/mL y CMB de 1,25 mg/mL. El análisis en el perfil metabólico permitió identificar cambios significativos en la abundancia de algunos metabolitos en el microorganismo, entre los que se encuentra: la pilocarpina, involucrada en la biosíntesis de alcaloides derivados de histidina y purina; la adenina, que afecta el metabolismo de las purinas y los nucleótidos; el ácido p-cumárico, involucrado en el metabolismo de la tirosina, entre otros. Estos metabolitos se encuentran asociados al efecto biológico causado por el AE sobre *P. aeruginosa*, lo cual refleja una alteración en las rutas metabólicas del microorganismo, ya que desempeñan un papel importante en diferentes procesos. Esta investigación destacó el importante papel de los AE como alternativas terapéuticas no antibióticas, logrando establecer diferentes rutas metabólicas que fueron afectadas para plantear el posible mecanismo de acción del AE de *L. origanoides* sobre la inhibición del crecimiento planctónico de *P. aeruginosa*.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-247-P ***EVALUACIÓN DEL CONTENIDO DE FENOLES Y LA ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DE SOLANUM OCHRANTHUM (SOLANACEAE) DE LA ECORREGIÓN CAFETERA***

Evaluación del contenido de fenoles y la actividad antioxidante de *Solanum ochranthum* (Solanaceae) de la ecorregión cafetera

Sharon A. González Henao*, Oscar M. Mosquera Martínez, Fernando Cardozo Peláez

Grupo de Investigación de Biotecnología-Productos Naturales (GB-PN), Escuela de Tecnología Química, Facultad de Tecnología, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.
*Autor de correspondencia: sharon.gonzalez@utp.edu.co

Palabras claves: Bioactividad; Bioprospección, Metabolitos secundarios; Neuroprotección.

La bioactividad de extractos de las especies de *Solanum* (*Solanaceae*) se han reportado tales como: neuroprotectora, anticancerígena, antimicrobiana y antioxidante, principalmente. En la ecorregión cafetera se destaca la especie *Solanum ochranthum*, de la cual, el conocimiento sobre las actividades biológicas y caracterización de los metabolitos secundarios de sus extractos es escaso. Por tal motivo, este estudio se realizó caracterización fitoquímica y la evaluación de la actividad antioxidante. La especie fue confirmada taxonómicamente y un ejemplar fue depositado en el herbario de la Universidad de Antioquía. De la parte aérea de *S. ochranthum* fueron obtenidos los extractos metanólicos (MET) y de diclorometano (DCM) a través de maceración pasiva y a los cuales se les realizó la evaluación preliminar de los metabolitos secundarios por cromatografía de capa delgada, determinación del contenido de compuestos fenólicos mediante Folin-Ciocalteu y la evaluación de la actividad antioxidante por los métodos de $DPPH^{\circ}$, $ABTS^{\circ+}$ y capacidad antioxidante total (CAT). Los fitocompuestos más abundantes detectados en los extractos fueron: Flavonoides, esteroles y alcaloides. El contenido de fenoles en los extractos de DCM y MET fue de 95,843 y 86,921 µg Ácido gálico/mg extracto, respectivamente. Mientras que la actividad antioxidante estos fue para el extracto MET: $DPPH^{\circ}$: 120,13 µg Trolox/mg extracto; $ABTS^{\circ+}$: 0,1829 µg Trolox/mg extracto; CAT: 244,62 µg Ácido gálico/mg extracto, y del extracto de DCM: $DPPH^{\circ}$: 72,47 µg Trolox/mg extracto; $ABTS^{\circ+}$: 0,0969 µg Trolox/mg extracto; CAT: 76,592 µg Ácido gálico/mg extracto; respectivamente. Con base en los resultados obtenidos permite inferir un potencial de uso de la especie *S. ochranthum* y de tener actividad neuroprotectora en modelos bilógicos *in vitro* e *in vivo* de la enfermedad de Parkinson.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-333-P ***SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE CÁLCULOS RENALES ARTIFICIALES, Y EL ESTUDIO DEL EFECTO DE EXTRACTOS DE PARIETARIA OFFICINALIS SOBRE SU FORMACIÓN Y SOLUBILIDAD***

Síntesis y Caracterización de Cálculos Renales Artificiales, y el Estudio del Efecto de Extractos de *Parietaria officinalis* Sobre su Formación y Solubilidad

Sonia A. Velásquez D. [a*], **Elizabeth Jiménez D.** [a]

[a] *Grupo de Investigación en Bioquímica Aplicada, Universidad de los Andes, Colombia*

Palabras Claves: Cálculos; Renales; Parietaria; Extractos

Los cálculos renales son una condición que afectan al 14,8% de la población mundial, causando dolor y heridas en las vías urinarias de quienes los padecen. Estos son depósitos de minerales y sales ácidas formados en las vías urinarias que en su mayoría están formadas por: oxalato de calcio monohidratado ($CaC_2O_4 \cdot H_2O$), ácido úrico ($C_5H_4N_4O_3$), o fosfato de calcio ($Ca_3(PO_4)_2$). Los tratamientos conocidos se consideran invasivos, y poseen varios efectos secundarios, por lo que surge la necesidad de evaluar nuevos tratamientos, entre ellos moléculas provenientes de extractos naturales. La *Parietaria officinalis* es una planta ampliamente estudiada por sus efectos antibacterianos y también es conocida por su efecto diurético siendo utilizada en el tratamiento de infecciones urinarias. Al ser una condición de amplio interés a nivel de salud pública, se desarrolló un trabajo de investigación en donde se estandarizó la metodología de síntesis y caracterización de cristales de oxalato de calcio monohidratado. Esta caracterización se realizó mediante las técnicas de (DRX) Difracción de Rayos X en polvo, FT-IR, y Raman. Por otra parte, se desarrollaron cinco metodologías de extracción (Infusión, arrastre por vapor, extracción asistida por microondas y por ultrasonido) realizadas a la planta *Parietaria officinalis*, y su caracterización en términos de cuantificación de flavonoides y análisis de carbohidratos. De igual manera se realizaron pruebas de prevención de la formación de cristales de oxalato de calcio en presencia de los cinco extractos, y también pruebas de solubilidad de los cristales de oxalato de calcio con cada extracto. Finalmente, se realizaron pruebas de los cinco extractos de *Paritaria* con cálculos renales. De estos ensayos se obtuvo una disminución en la formación de cristales de oxalato de calcio monohidratado, y la solubilización de estos, en presencia de los extractos, principalmente con los obtenidos por arrastre por vapor y asistido por ultrasonido.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-363-P ***EVALUACIÓN IN SILICO DE LA INTERACCIÓN DEL CANAL DE POTASIO KV3.1 Y UNA TOXINA EXTRAÍDA DEL VENENO DEL ESCORPIÓN TITYUS MACROCHIRUS***

Evaluación *in silico* de la interacción del canal de potasio Kv3.1 y una toxina extraída del veneno del escorpión *Tityus macrochirus*

Juliana V Rodríguez Salcedo, [a*] **David L Sotelo.** [a]

[a] *Semillero de investigación Bioside, Fundación Universidad de América, Colombia*
** Autor de correspondencia: juliana.rodriguez3@estudiantes.uamerica.edu.co*

Palabras Claves: Péptidos, Cáncer, Tityus Macrochirus, Escorpión, Biomédico, Canales iónicos

A partir de los avances tecnológicos y biomédicos se observa un nuevo campo a tratar en el uso de toxinas de animales para aplicaciones terapéuticas en enfermedades cancerígenas, neurodegenerativas, cardiovasculares, autoinmunes entre otros [1]. Teniendo en cuenta que muchos de los tratamientos del cáncer no son recibidos de la misma manera en cada cuerpo, la búsqueda de tratamientos o una solución definitiva hacia esta enfermedad. Uno de los tratamientos más común es la realización de la quimioterapia sin embargo se observa un deterioro física y mentalmente en el paciente [2].

Por esta razón, en este trabajo de investigación se busca estudiar un péptido maduro purificado del veneno del escorpión *Tityus macrochirus*, especie endémica de nuestro país. Ya es bien sabido que los venenos del escorpión contienen sales, nucleótidos, aminoácidos, enzimas como fosfolipasa, hialuronidasa, L-aminoácido oxidasa, metaloproteinasa [1] entre otras moléculas.



Figure 2. Estructura 3D de la secuencia del péptido maduro Tma2_31_aa (Tityus Macrochirus), (KKDDYPVDTAERNCKFECNIVDDKGYCDNLC)



Figure 1.Estructura 3D de la secuencia completa del péptido Tma2_31_aa (Tityus Macrochirus), (MNCLMLIFVVFLLAFGVECKKDDYPVDTAERNCKFECNIVDDKGYCDNLCKGRKA)

Dentro de los avances obtenidos hasta el momento, se estableció que el péptido tiene un total de 89 residuos de aminoácidos frente a los 30 reportados en la secuenciación. Así mismo, se generaron modelos 3D en las bases de datos Swiss model, I-taser y Pep-fold con el fin de establecer su estructura terciaria.

Posteriormente, se determinarán las energías de enlace entre los péptidos modelados y el canal de potasio Kv3.1 empleando los programas Autodock tolos y Autodock Vina. Los resultados de este trabajo permitirán comprender los mecanismos y regiones de unión entre toxinas de especies venenosas y canales iónicos de diferentes tipos de células.

Referencias

[1] I. Boutitah, F. Moyano, L. Grado, and E. Biotecnología, "APLICACIONES BIOMÉDICAS DE TOXINAS ANIMALES TRABAJO FIN DE GRADO." Available: http://repositorio.ual.es/bitstream/handle/10835/13509/BOUTITAH%20%2C%20IMANE.pdf?sequence=1&isAllowed=y [2] "DIFERENCIAS EN LA CALIDAD DE VIDA: UN ESTUDIO LONGITUDINAL DE PACIENTES DE CÁNCER RECIBIENDO TRATAMIENTO DE QUIMIOTERAPIA | Anales de Psicología / Annals of Psychology". Revistas Científicas de la Universidad de Murcia. https://revistas.um.es/analesps/article/view/29251 (accedido el 28 de marzo de 2023).

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-409-P ***ANÁLISIS GENÉTICO USANDO ISOELECTROENFOQUE (IEF) DE LA B- CASEÍNA EN GANADO DE RAZA HOLSTEIN DEL DEPARTAMENTO DE NARIÑO.***

Análisis Genético Usando Isoelectroenfoque (IEF) de la β- caseína en Ganado de Raza Holstein del Departamento de Nariño.

Kelly J. Oliva [a]*, Abel J. Rivera [a], Jesús A. Romo [a], Juan C. Zambrano [a]

[a] *Grupo de investigación en Bioquímica y Estudios Genéticos (BIOGEN), Universidad de Nariño, Colombia.*
** Autor de correspondencia: kjoliva15B@udenar.edu.co*

Palabras Claves: Leche; β-caseína; ganado Holstein; Electroforesis; Isoelectroenfoque

La leche al ser un alimento de consumo masivo, confiere al consumidor gran cantidad de macronutrientes, entre ellos se encuentran las proteínas, resaltando a las β-caseínas, de las cuales se conoce alrededor de 14 variantes genéticas, siendo las más estudiadas las variantes A1 y A2. Cabe mencionar que en algunos países la leche es clasificada como A1 y A2, es decir, según el tipo de variante de la β-caseína que esté presente y dicha clasificación se debe a los efectos que tiene para la salud humana. Investigaciones previas han demostrado que la digestión de la forma A1 de la β-caseína libera en el tracto gastrointestinal un heptapéptido con actividad opiácea denominado betacasomorfina-7 (BCM-7), el cual atraviesa las microvellosidades intestinales, generando a nivel sistémico una respuesta inmunológica, que conduce a la aparición de patologías como la diabetes, enfermedades cardiovasculares y algunos trastornos neurológicos. En base a esto se plantea como objetivo, realizar un análisis genético de las β-caseínas de leche de vacas de raza Holstein del departamento de Nariño, haciendo uso de técnica molecular de isoelectroenfoque (IEF). Fueron evaluadas 83 vacas en producción provenientes de 10 hatos de la región lechera del Departamento de Nariño. Para llevar a cabo el IEF se utilizó una cámara de electroforesis vertical, estableciendo las condiciones adecuadas para la preparación del gel y la preparación del buffer de carga, centrándose en el uso de anfolitos ZOOM de pH 4-6 y pH 3-10 a concentraciones de 1,5% y 0,5 % respectivamente. Las frecuencias alélicas calculadas para los alelos A1 y A2, fueron 0,542 y 0,458 respetivamente y las frecuencias genotípicas para los genotipos A1A1, A1A2 y A2A2 fueron 0,084, 0,916 y 0.00, respectivamente. La técnica IEF permitió identificar las variantes alélicas A1 y A2 de la β-caseína bovina directamente en leche, siendo el alelo y genotipo más frecuentes el A1 y A1A2.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-415-P ***ESTUDIO IN SILICO DE INTERACCIÓN DE UNA TOXINA (TMA1) OBTENIDA DEL VENENO DEL ESCORPIÓN TITYUS MACROCHIRUS CON EL CANAL DE POTASIO KV3.1***

Estudio *in silico* de interacción de una toxina (Tma1) obtenida del veneno del escorpión *Tityus macrochirus* con el canal de potasio Kv3.1

Tatiana V. Marin[a], **Alejandra C. Peralta***[a], **David L Sotelo**[a]

[a] *BIOSIDE, Universidad de América, Colombia*

* *Autor de correspondencia: alejandra.peralta@estudiantes.uamerica.edu.co*

Palabras Claves: *Tityus macrochirus*; toxinas; secuencias; modelamiento; cáncer.

El cáncer es la principal causa de muerte en todo el mundo según la OMS, por esto se buscan nuevas estrategias para su tratamiento diferentes a las usadas hoy en día como lo son las quimioterapias y la radioterapia, puesto que estas causan efectos secundarios a largo plazo. Estas nuevas estrategias se enfocan en el uso de toxinas animales para proporcionar fármacos antitumorales, esto es debido a que estas toxinas presentan moléculas con actividad citotóxicas, en otras palabras, eliminan células cancerígenas. Actualmente, se han aprobado 11 medicamentos derivados del veneno de animales para su uso en humanos.Uno de los blancos terapéuticos más promisorios para el tratamiento de múltiples tipos de cáncer son los canales iónicos, de los cuales se sabe que al interactuar con diferentes toxinas pueden regular de forma negativa o positiva el funcionamiento de la célula causando muerte celular; y dentro de los tipos de toxinas que han sido estudiadas recientemente se encuentran los péptidos de escorpión.

Teniendo en cuenta esto, el presente proyecto se centra en analizar la interacción de una toxina (denominada como Tma1) extraída del veneno del escorpión *Tityus macrochirus* con el canal de potasio Kv3.1; ampliamente reportado en literatura por su presencia en diferentes tipos de cáncer como pulmón y seno. El péptido a trabajar fue purificado a partir del veneno de este escorpión y secuenciado, por lo que solo conoce su estructura primaria, a partir de la cual se generarán modelos 3D en bases de datos como Swiss-Model, I-Tasser, Phyre2 y Pep-fold. Mediante un abordaje *in silico,* se pretenden mostrar los posibles sitios de unión y afinidades de ambos compuestos proteicos, empleando el docking molecular.

Hasta este momento, hemos obtenido resultados de caracterización de la toxina Tma1 mediante alineamiento en bases de datos indicando que su estructura de 34 aminoácidos corresponde a un péptido maduro que originalmente tenía una secuencia más larga de 86 aminoácidos, se encuentra en escorpiones del mismo género (Tityus) y ha sido reportada en la especie serrulatus con algunas variaciones en posiciones clave para la formación de puentes disulfuro por presencia de cisteínas. Los resultados de esta investigación contribuirán al entendimiento los mecanismos de unión entre toxinas de origen en especies venenosas y canales iónicos en diferentes tipos de células.

Referencias

[1] World, "Cáncer," Who.int, Feb. 03, 2022. https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/cancer (accessed Mar. 26, 2023).

[2] I. Boutitah, F. Moyano, L. Grado, and E. Biotecnología, "APLICACIONES BIOMÉDICAS DE TOXINAS ANIMALES TRABAJO FIN DE GRADO." Available: http://repositorio.ual.es/bitstream/handle/10835/13509/BOUTITAH%20%2C%20IMANE.pdf?sequence=1&isAllowed=y

[3] K. de C. F. Bordon et al., "From Animal Poisons and Venoms to Medicines: Achievements, Challenges and Perspectives in Drug Discovery," Frontiers in Pharmacology, vol. 11, Jul. 2020, doi: https://doi.org/10.3389/fphar.2020.01132.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-419-P ***DEGRADACIÓN DE POLIESTIRENO DE DENSIDAD MEDIA MEDIANTE EXTRACTOS ENZIMÁTICOS DE ASPERGILLUS NIGER CMPUJ:H002 UTILIZANDO CÁSCARAS DE YUCA COMO SUSTRATO***

Degradación de Poliestireno de densidad media mediante Extractos Enzimáticos de *Aspergillus niger* CMPUJ:H002 Utilizando Cáscaras de Yuca como Sustrato

Laura B. Osorio [a], **Nicolás Palacios** [a], **David L Sotelo** [a]

[a] *Semillero de Investigación BIOSIDE, Fundación Universidad de América, Colombia*
** Autor de correspondencia: laura.osorio4@estudiantes.uamerica.edu.co*

Palabras Claves: Biodegradación; Microorganismos; Poliestireno de densidad media; Enzimas; *Aspergillus niger*.

Los polímeros de densidad media presentan problemáticas ambientales como la no biodegradabilidad, las dificultades de reciclado, efectos negativos sobre la fauna, sus elevados costes de producción, repercusiones ambientales asociadas a su producción y contaminación por microplásticos. Colombia es uno de los países de América Latina con problemáticas más significativas en términos del manejo adecuado de los desechos plásticos, esto a causa de la falta de conciencia ambiental. En el mes de junio del año 2019, la Procuraduría General de la Nación confirmó que cada colombiano usa dos kilos de plástico al mes, 24 kilos al año, lo que equivale a un millón de toneladas de año de plásticos del que solo se recicla un 7%.

La biodegradación de los polímeros de densidad media mediante extractos enzimáticos es un campo de estudio que ataca el problema de la biodegradabilidad de estos polímeros e implica la acción de varios tipos de enzimas de distintas familias. La eficacia del proceso de biodegradación depende de factores como el tipo de polímero, las condiciones ambientales, disponibilidad de microorganismos y enzimas adecuadas. Microorganismos como *Aspergillus niger* tienen preferencia por los medios de crecimiento ricos en almidón como fuente de carbohidratos. La cáscara de yuca es un residuo agroindustrial rico en polisacáridos como el almidón del cual contiene aproximadamente un 35% en base seca. Teniendo en cuenta lo anterior, en este proyecto se pretende evaluar la degradación de láminas de poliestireno de densidad media mediante extractos enzimáticos de *Aspergillus niger* CMPUJ:H002 utilizando cáscaras de yuca como sustrato de cultivo. Las cáscaras de yuca son un residuo agroindustrial no aprovechado que contiene los nutrientes necesarios para el crecimiento del hongo, por lo que serán empleadas para su crecimiento y posteriormente se generará un extracto enzimático.

Se emplearán láminas de poliestireno de densidad media con y sin pretratamiento mediante exposición a radiación UV, para después ponerlas en contacto directo con el extracto enzimático. Un estricto seguimiento del proceso mediante la determinación de peso permitirá saber el porcentaje de degradación. Finalmente, las láminas de poliestireno serán analizadas por microscopía electrónica de barrido para conocer la afectación estructural desarrollada por las enzimas.

Se debe mencionar que los extractos enzimáticos serán cuantificados para emplear concentraciones iguales en cada proceso de degradación, y se caracterizarán mediante electroforesis en gel de poliacrilamida SDS-PAGE para conocer las características de las enzimas presentes.

Siendo un proyecto que se encuentra en desarrollo se espera que la cáscara de yuca sea un medio óptimo para obtener el extracto enzimático y que la degradación de las láminas de Polietileno de densidad media sea mayor al 3%.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-429-P ***GENERACIÓN DE UNA BIBLIOTECA DE ADN CONTRA EL PÉPTIDO AB-40 HUMANO UTILIZANDO EL MÉTODO PROTEIN-SELEX.***

Generación de una Biblioteca de ADN contra el Péptido Aβ-40 Humano Utilizando el Método Protein-SELEX.

Laura D Galindo [a*], **Álvaro A Barrera** [b], **Elizabeth Jiménez-Diaz** [a]

[a] *Grupo de Investigación en Bioquímica Aplicada, Universidad de los Andes, Colombia*
[b] *NATURA, Universidad ICESI, Colombia*
* ld.galindo@uniandes.edu.co

Palabras Claves: Alzheimer; SELEX; Aβ40; ADN; Citometría

El envejecimiento de la población mundial, incluida la de nuestro país, ha aumentado el número de personas con enfermedades no transmisibles como las demencias. Estas están causadas por diversas alteraciones del cerebro que afectan funciones cognitivas como la memoria, el aprendizaje, el comportamiento y la capacidad de realizar tareas de la vida diaria. Hasta el momento no existe cura ni tratamientos que modifiquen la aparición o progresión de este tipo de enfermedades.

La forma más común de demencia es la enfermedad de Alzheimer (EA), que se estima contribuye al 60%-80% de los casos y se caracteriza por la presencia de placas amiloides en el cerebro, las cuales son agregados extracelulares de péptidos beta-amiloides Aβ40 y Aβ42 (A). De manera que surge la hipótesis de la agregación de A como desencadenante crítico de los acontecimientos moleculares que conducen a la disfunción neuronal y la demencia. Por tanto, interferir en la agregación de A puede tener un efecto notable en el curso de la EA ya que detendría o retrasaría una de las principales causas de disfunción neuronal.

La cura de la EA sigue siendo desconocida, por lo que es necesario la creación de nuevas terapias para tratar a los pacientes afectados y prevenir, disminuir el deterioro cognitivo o mejorar los síntomas de la enfermedad. Los aptámeros son moléculas de ácidos nucleicos capaces de unirse con alta afinidad a proteínas específicas y en algunos casos modular su función. De esta manera el uso de aptámeros surge como una alternativa para evitar el proceso de agregación de los péptidos A, uniéndose de manera selectiva y especifica a los monómeros de la proteína, convirtiéndose en un tratamiento prometedor para la EA.

Para llevar a cabo este propósito se utilizó la tecnología de protein-SELEX durante 17 ciclos, desarrollándose una librería de ADN enriquecida y con afinidad hacia el péptido Aβ-40. Este enriquecimiento fue monitoreado mediante citometría de flujo llegando a la obtención de oligonucleótidos de alrededor de 80 pares de bases con especificidad hacia la proteína Aβ-40.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VII-448-P ***ESTUDIO DEL POTENCIAL BIOSINTÉTICO DE HONGOS MACROMICETOS PARA LA PRODUCCIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE PLATA***

Estudio del Potencial Biosintético de Hongos Macromicetos para la Producción de Nanopartículas de plata

Karen D Mayne [a]*, Carolina Chegwin [b], Cesar A Sierra [c], Mayra E Beltrán Pineda [d]

[a] *Semillero de bioprospección fúngica, Universidad Nacional de Colombia, Colombia*
[b] *Grupo de Química de Hongos macromicetos, Universidad Nacional de Colombia, Colombia*
[c] *Grupo de Química de Macromoléculas, Universidad Nacional de Colombia, Colombia*
[d] *Grupo de investigación Gestión ambiental Universidad de Boyacá, Colombia*
** Autor de correspondencia: kmayne@unal.edu.co*

Palabras Claves: Micosíntesis, hongos macromicetos, nanopartículas de plata, nitrato reductasa.

La miconanotecnología es un área reciente con un rápido crecimiento, que permite la biosíntesis de nanopartículas con alta estabilidad, buena dispersión y biocompatibilidad para diferentes aplicaciones. En el presente trabajo se realizó un estudio preliminar de bioprospección de seis especies de hongos macromicetos *(Pleurotus ostreatus var columbinus (PO), Lentinula edodes (LE), Agrocybe sp (AG), Ganoderma lucidum (GL), Inonotus sp (IN), Hexagonia papyracea (HP))* para la producción de nanopartículas de plata (AgNp's).

Inicialmente se realizó un ensayo cualitativo para evaluar la producción de la enzima nitrato reductasa (NR), relacionada en estudios previos con la síntesis de AgNp´s. Las especies *PO, LE, AG, GL, IN* se cultivaron en un caldo nitratos (6 días/100 rpm/25°C) sin detectar cualitativamente presencia de nitritos indicando que no hay un resultado positivo de la actividad enzimática evaluada. Se repitió este ensayo para todas las especies aumentando el tiempo de inducción a 15 días, observando la producción enzimática en la especie *HP*. Posteriormente se realizó un ensayo cuantitativo de la actividad NR tanto en el medio de cultivo agotado (sobrenadante obtenido a partir de la separación de la biomasa), como en el filtrado celular libre de micelio (FCLM), obtenidos en el medio de cultivo Sabouraoud Dextrosa (SDB) para las especies *PO, LE, GL, IN* y *HP*, pero no se detectó la enzima de interés. No obstante, se realizó la reacción de biosíntesis de AgNp´s con las especies *PO, IN, HP, LE y GL* empleando como medio de crecimiento SDB y mezclando el FCLM obtenido con 1 mM $AgNO_3$ (1:1) manteniendo en oscuridad/100rpm/25°C/6 días. Realizado el espectro UV-vis al producto de biosíntesis, se observaron valores de absorbancia entre 450 nm y 550 nm asociados a la formación de AgNp´s para las especies *PO, IN* y *HP*, sin embargo, es necesario utilizar técnicas como SEM-EDS que permitan verificar la formación de las nanopartículas. Estos resultados concluyen que los hongos macromicetos *PO, HP* e *IN* preliminarmente, tienen potencial como productores de AgNp´s, convirtiéndose en un aporte muy valioso para la miconanotecnología, teniendo presente que la mayoría de reportes para los procesos de biosíntesis de las nanopartículas que existen, emplean micromicetos.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

ENERGÍAS RENOVABLES

X-16-P ***APROVECHAMIENTO DE RESIDUOS GENERADOS EN PROCESOS AGROINDUSTRIALES EN LA INDUSTRIA MEZCALERA***

Aprovechamiento de Residuos Generados en Procesos Agroindustriales en la Industria Mezcalera

Edna C Garzón [1], María C Rodríguez [1], Harvey A Milquez[1], David L Sotelo[1].

[1] *Grupo de Procesos de Separación no Convencionales GPS, Fundación Universidad de América, Colombia.*

** Autor de correspondencia: edna.garzon@estudiantes.uamerica.edu.co*

Palabras Claves: Hidrólisis; bagazo de agave; azucares fermentables; fermentación; etanol.

El estado de Durango, México, cuenta con una gran cultura y tradición gastronómica con bebidas como el mezcal y el tequila, los cuales son productos representativos del país obteniéndose por la fermentación del agave. La cabeza de piña del *Agave durangensis* es la materia prima principal para el proceso de producción del mezcal. Su demanda a nivel nacional en México se presenta alrededor de 1'200.000 toneladas anuales, en el cual en su procesamiento se puede llegar a generar 200.000 toneladas anuales de bagazo aproximadamente. Este residuo no es aprovechado, representando un problema para el medio ambiente y para productores mezcaleros al no haber encontrado una alternativa económicamente factible para el aprovechamiento del residuo agroindustrial. Una de las alternativas de aprovechamiento de estos residuos es la recuperación de los azúcares reductores, que pueden ser fermentados en etanol, considerado un vector energético.

La experimentación de esta alternativa de aprovechamiento inicia con la caracterización del bagazo de *agave durangensis*, midiendo propiedades fisicoquímicas como humedad, pH, cenizas, entre otros. Seguidamente, se procedió a realizar hidrólisis ácidas con soluciones diluidas de ácido clorhídrico en tres pH diferentes, pH 2, pH 3 y pH 4 en tiempos de reacción de 15, 30 y 40 minutos, a una temperatura constante de 80 °C y una relación 1:15 g/mL; teniendo en cuenta estas condiciones se midieron los azúcares reductores por el método de ácido 3-5 dinitro salicílico (DNS) dando como resultado que la mayor obtención de azucares reductores se obtuvo en un pH 3 con un tiempo de reacción de 40 minutos alcanzado una conversión de azucares de 13,03 g/L. Esto se lleva a cabo con el fin de obtener la mayor cantidad de azúcares y así fermentarlos durante un tiempo de 7 días utilizando la levadura "*Saccharomyces cerevisiae*" produciendo etanol; debido a que esta fermentación presenta residuos sólidos provenientes del proceso de hidrólisis fue necesario realizar una destilación extractiva utilizando como solvente glicerol y así recuperar etanol del 96%. Este proyecto se lleva a cabo con el fin de realizar una comparación entre el rendimiento de etanol producido y el rendimiento obtenido en literatura.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

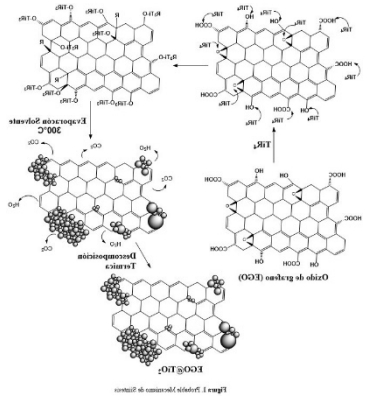
X-17-P SÍNTESIS DE FOTOCATALIZADORES A BASE DE TIO2/ÓXIDO DE GRAFENO (OXIDADO EN LOS BORDES) PARA LA PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO POR MÉTODO SOL-GEL

Síntesis de Fotocatalizadores a Base de TiO_2/Óxido de Grafeno (Oxidado en los Bordes) para la Producción de Hidrógeno por Método Sol-gel

Elizabeth Y. Urrea-Gonzalez[a], Claudia Cajicá-Trillos[b], Rafael Cabanzo-Hernández[c], Enrique Mejía-Ospino[c*]

*[a] Laboratorio de Espectroscopia Atómica y Molecular (LEAM), Universidad Industrial de Santander, Parque Tecnológico Guatiguará, Km 2, Piedecuesta, Santander, Colombia, *Autor de correspondencia e-mail: emejia@uis.edu.co*

Palabras Claves: Oxido de grafeno; Método Sol-gel; Fotocatálisis.



La creciente demanda energética mundial ha ocasionado un ascenso en los niveles de contaminación ambiental, motivando a la comunidad científica a la búsqueda de la disminución de las emisiones de gases de efecto invernadero y una rápida transición energética parcial o total. El hidrógeno molecular es considerado un sistema de almacenamiento de energía limpia dado que no genera contaminantes nocivos y además presenta una alta densidad de energía por unidad de masa [1]. Entre las diferentes técnicas que han sido evaluadas para la obtención de hidrógeno molecular a gran escala destacan los procesos fotocatalíticos, ya que involucran el uso de radiación solar y materiales sintéticos con propiedades controlables que pueden ser escalables a nivel industrial [2]. Dentro de los fotocatalizadores prometedores se encuentra el TiO_2 por su estabilidad térmica y química, y resistencia a la corrosión [1]; aunque los límites para la producción de hidrógeno usando TiO_2 son la baja área superficial para llevar a cabo los procesos redox y una alta recombinación de los pares electrones/hueco. Para este proyecto se desea aumentar la actividad fotocatalítica de este material acoplándolo a un material grafénico como el grafeno oxidado en los bordes (EGO) debido a que los materiales grafénicos presentan una alta superficie especifica y evitan la recombinación de los fotoelectrones generados en el proceso. Para la funcionalización del TiO_2 (EGO@TiO_2) se realizó una síntesis sol-gel in situ **(Figura 1)** [3][4], para la confirmación de la presencia de TiO_2 en el EGO se usaron las técnicas de SEM, Raman, DRX, FT-IR, la caracterización del material ratificó la funcionalización exitosa EGO@TiO_2.

[1] Yan, Y., Li, J., Jia, T., Li, H., Shen, K., & He, Z. (2021). Preparation of TiO2-Based Photocatalysts Synergistically Modified with Fe3+-Graphene and Their Visible-Light-Catalyzed Hydrogen Production from Ammonia Borane. Energy and Fuels, 35(19), 16035–16045. https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.1c01893

[2] Kim, J. W., Boo, K. J., Cho, J. H., & Moon, I. (2014). 1 - Key challenges in the development of an infrastructure for hydrogen production, delivery, storage and use. In A. Basile & A. Iulianelli (Eds.), Advances in Hydrogen Production, Storage and Distribution (pp. 3–31). Woodhead Publishing. https://doi.org/https://doi.org/10.1533/9780857097736.1.3.

[3] Tadjarodi, A., & Ferdowsi, S. M. (2016). The novel synthesis of highly water-soluble few-layer graphene nanosheets by a simple one-pot chemical route and without any modification. Materials Chemistry and Physics, 183, 297–305. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2016.08.030

[4] Jastrzebska, A. M., Karcz, J., Letmanowski, R., Zabost, D., Ciecierska, E., Siekierski, M., & Olszyna, A. (2016). Synthesis of RGO/TiO2 nanocomposite flakes and characterization of their unique electrostatic properties using zeta potential measurements. Journal of Alloys and Compounds, 679, 470–484. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2016.04.043

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA

XII-20-P ***CARACTERIZACIÓN DE LA BIOACTIVIDAD DEL ACEITE ESENCIAL DE CARDAMOMO: UNA PERSPECTIVA PARA LA ENSEÑANZA DEL CONCEPTO ESTRÉS OXIDATIVO***

Caracterización de la Bioactividad del Aceite Esencial de Cardamomo: una Perspectiva para la Enseñanza del Concepto Estrés Oxidativo

Brenda Ardila Velásquez [a*], Leidy J. Ramírez Gaona [b], Rodrigo Rodríguez Cepeda [c]

[a] *χημεία (Chiemeía) Student Chapter UPN-ACS, sobre enseñanza-aprendizaje de la química y bioquímica en contexto., Universidad Pedagógica Nacional, Colombia.*
[b] *χημεία (Chiemeía) Student Chapter UPN-ACS, sobre enseñanza-aprendizaje de la química y bioquímica en contexto., Universidad Pedagógica Nacional, Colombia.*
[c] *χημεία (Chiemeía) Student Chapter UPN-ACS, sobre enseñanza-aprendizaje de la química y bioquímica en contexto., Universidad Pedagógica Nacional, Colombia.*
**Autor de correspondencia: bardilav@upn.edu.co*

Palabras clave: Estrés oxidativo; enseñanza-aprendizaje; Aprendizaje Basado en Problemas; Flipped Classroom, Bioquímica.

Los modelos didácticos por si solos no demuestran logros o dificultades académicas de los estudiantes, tal vez la aplicación de ellos en algún tipo de población si podría evidenciar algunos avances o problemas que tengan los individuos a quienes se les aplicó el modelo.

Desde esta perspectiva, el presente trabajo propuesto pretende diseñar y aplicar una unidad didáctica en el marco del modelo ABP y el Flipper classroom en el contexto de las enfermedades cancerígenas, y los posibles usos de aceites esenciales en la prevención de dichas enfermedades, por tanto, se espera aportar en el aprendizaje de los conceptos asociados al estrés oxidativo y sus implicaciones bioquímicas.

La contribución de la bioquímica en los últimos años ha permitido desarrollar nuevas herramientas como las ciencias ómicas y grandes bases de datos que resumen trabajos en áreas como la genética o el metabolismo, por ello, cada vez se considera como una ciencia muy compleja y difícil de proponer procesos de enseñanza-aprendizaje, a tal punto que aún persiste el modelo memorístico, con todas las dificultades que esto implica. De acuerdo con lo anterior, con el presente proyecto se pretende generar un impacto en la forma como se enseña a nivel universitario los conceptos propios de la bioquímica.

Para el desarrollo de la presente investigación se ha propuesto una metodología mixta (MM), la cual integra el enfoque cualitativo y cuantitativo con una población finita y sin grupo control. En tal sentido, la población objeto de estudio son estudiantes universitarios de Licenciatura en química. La investigación se desarrollará en tres fases: Identificación de conceptos previos, diseño y aplicación de la unidad didáctica, sistematización y análisis de resultados.

En la actualidad la investigación se encuentra en la fase experimental, por lo que se ha realizado la caracterización fisicoquímica del aceite esencial de cardamomo, a través de seis métodos: Marcha Fitoquímica, Espectroscopia Infrarroja, Cromatografía de gases, Cromatografía de gases masas, Rancimat, y DPPH.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XII-283-P ***ESTUDIO PRELIMINAR PARA LA SÍNTESIS EFICIENTE DE CHALCONA Y DIBENZALACETONA EN UNA PRÁCTICA DE LABORATORIO DE QUÍMICA ORGÁNICA***

Estudio Preliminar para la Síntesis Eficiente de Chalcona y Dibenzalacetona en una Práctica de Laboratorio de Química Orgánica

Edwin Mosquera[a], Daniela Buitrago[a], Valentina Castaño[a], Eliana C. Sánchez[a], Elkin Galeano[b], Francisco J. Jiménez-González[a]*

[a] Grupo Polifenoles-Escuela de Tecnología Química, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia
[b] Grupo de investigación en Sustancias Bioactivas-GISB, Facultad de Ciencias Farmacéuticas y Alimentarias, Universidad de Antioquia, Colombia
** Autor de correspondencia: jjimenez@utp.edu.co*

Palabras Claves: Condensación aldólica; síntesis orgánica; ultrasonido

Las chalconas y *bis*-chalconas son compuestos que contienen anillos aromáticos unidos por un sistema de cetona *α,β*-insaturado o *α,α',β,β'*-diinsaturado. Estas enonas han sido aisladas a partir de algunas especies vegetales con importantes actividades biológicas. Como estrategia de síntesis de chalconas y *bis*-chalconas, se ha reconocido la reacción de Claisen-Schmidt como la más efectiva para la formación de un enlace carbono-carbono, aunque la reacción bajo condiciones convencionales conlleva a tiempos prolongados. Por lo anterior, en esta investigación se desarrolló una metodología eficiente mediada por ultrasonido para la síntesis de chalcona (*chal*) y dibenzalacetona (*dba*), con aplicación en prácticas de laboratorio de Química Orgánica.

Para la síntesis de *chal*, se mezclaron benzaldehído (1 mL), etanol (7 mL) y NaOH (2 M; 1,5 mL). Después se sometió la mezcla a ultrasonido, y gota a gota se añadió lentamente acetofenona (1,1 mL) durante 15 min. Seguidamente se enfrió la mezcla, se agitó y se añadió agua destilada fría. Una vez formado el precipitado, la mezcla se filtró al vacío y los cristales se lavaron con etanol frío. Para la síntesis de *dba* se mezclaron NaOH (15%; 1 mL), etanol (1,6 mL), benzaldehído (0,20 mL) y acetona (0,07 mL). Después se sometió la mezcla a ultrasonido durante 15 min y se cristalizó en un baño de hielo. Una vez formados los cristales se recogieron por filtración al vacío, se lavaron con porciones agua fría y se secaron. Los procedimientos anteriores se repitieron con ultrasonido por 5 min, y los resultados fueron comparados con el método convencional. El análisis de los productos *chal* y *dba* se realizó por comparación de los puntos de fusión, espectros de infrarrojo y RMN-^{1}H con lo reportados en la literatura.

Como resultado de la reacción por ultrasonido, se obtuvieron rendimientos del 37,3 y 68,3% para *chal* a 15 y 5 min, y 81,4 y 66,2% para *dba* a 15 y 5 min. Por el método convencional, se obtuvieron rendimientos entre 20% para *chal* y del 72,77% para *dba*; lo que supone que la utilización de ultrasonido incrementa significativamente la obtención de *chal* y *dba* a 5 y 15 min, respectivamente.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

FISICOQUÍMICA

VIII-28-P ***PROPIEDADES FÍSICAS DE POLÍMEROS SUPRAMOLECULARES AMIGABLES CON EL AGUA DE CMC CON ISÓMEROS DE NITROFENILMALEIMIDAS***

Propiedades Físicas de Polímeros Supramoleculares Amigables con el Agua de CMC con Isómeros de Nitrofenilmaleimidas

Maribel Montoya [a*], Hoover A. Valencia, Héctor F. Cortes

[a]Universidad Tecnológica de Pereira, Escuela de Tecnología Química
[*]Autor de. correspondencia: maribelm@utp.edu.co

Palabras clave: Carboximetilcelulosa, nitrofenilmaleimidas, propiedades térmicas y mecánicas, biodegradabilidad, teoría de los funcionales de densidad.

El entrecruzamiento no covalente de la carboximetilcelulosa (CMC), con otras moléculas orgánicas que contengan átomos que faciliten la interacción de enlace de hidrógeno, ha generado diversas aplicaciones en materiales, medicina, entre otras áreas. Por su parte, las maleimidas han sido compuestos útiles en la industria de los polímeros, ya que ofrecen una variedad de mejoras como resistencia al calor y propiedades dieléctricas y mecánicas en los polímeros obtenidos. en la presente investigación se evaluaron nuevos polímeros no covalentes como los supramoleculares compatibles con el agua (WCSP) basados en la interacción de la CMC de alta viscosidad con grado de sustitución promedio de 1.0 e isómeros de nitrofenilmaleimidas. Estos últimos fueron sintetizados y caracterizados por cromatografía de gases acoplado a masas, IR y punto de fusión, posteriormente se realizaron mezclas de nitrofenilmaleimidas con CMC al 2 %, a diferentes concentraciones y temperaturas, evaluando la viscosidad como variable de respuesta, para seleccionar las mejores condiciones. Las mezclas seleccionadas se llevaron a formar películas por el método de casting y así evaluar sus propiedades fisicoquímicas, mecánicas y biológicas. La explicación de la interacción fue realizada por medio de cálculos computacionales con el método LC-wPBE/6-311G(2d,2p) entre 5 monómeros de la CMC y cada uno de los isómeros de la nitrofenilmaleimida que permite detallar el comportamiento de los polímeros obtenidos; los cuales muestran con respecto a la CMC un aumento en la viscosidad y un cambio en las propiedades térmicas y mecánicas, debido al enlace de hidrógeno formado entre los precursores. Así mismo, todas las muestras exhiben biodegradabilidad en compost, lo que permite una aplicación en la fabricación de empaques con fácil degradación, resistencia térmica y mecánica.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VIII-29-P ***ELECTROSÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE PELÍCULAS DE POLIPIRROL DOPADAS CON TETRAKIS(4-CARBOXIFENIL)PORFIRINA Y SU POTENCIAL USO COMO FOTOCÁTODO.***

Electrosíntesis y Caracterización de Películas de Polipirrol Dopadas con Tetrakis(4-carboxifenil)porfirina y su Potencial Uso como Fotocátodo.

Felipe Martínez[1]*, Martín E González[1], Jhon D Puerres[2], María T Cortés[1]

1. Departamento de Química, Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia
2. Programa de Ingeniería Química, Universidad de La Salle, Bogotá, Colombia
** Autor de correspondiente: f.martinezg1@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: Electrosíntesis; Películas; Polipirrol; Fotocátodo.

En este trabajo se realizó la síntesis electroquímica por técnica galvanostática de películas de polipirrol (PPy) dopadas con la tetrakis(4-carboxifenil)porfirina (TCPP) sobre sustratos de FTO. Las películas se caracterizaron física y electroquímicamente para evaluar su desempeño como fotoelectrodo en una celda fotoelectroquímica. La obtención del polímero dopado (PPy/TCPP) fue confirmada mediante espectroscopía de absorción UV-Vis y FTIR. La caracterización fotoelectroquímica evidenció que el polímero presenta dopaje tipo-n- y que exhibe actividad fotocatalítica a sobrepotenciales de reducción. Adicionalmente, se determinaron por primera vez los valores del HOMO y del band gap de este material (PPy/TCPP) mediante voltamperometría cíclica y el diagrama de Tauc. También se observó que las películas presentan buena estabilidad durante periodos largos de iluminación (3000 s) con un promedio de fotocorriente de 14 µA/cm^2, el cual es un valor importante comparado con fotocátodos de polímeros similares, algunos de ellos no netamente orgánicos[1]. Por lo tanto, con base en el desempeño electroquímico, se concluye que este material es un promisorio fotocátodo en celdas electroquímicas o un adecuado recubrimiento para mejorar la fotoactividad de fotocátodos inorgánicos[2]. Adicionalmente, se muestra la factibilidad que tiene este método de síntesis en términos de reactivos, residuos e infraestructura comparado con otros métodos de obtención de materiales fotoactivos.

Bibliografía

1. Seidler, Bianca, Ruri Agung Wahyuono, Pascal Wintergerst, Johannes Ahner, Martin D. Hager, Sven Rau, Ulrich S. Schubert, and Benjamin Dietzek. "Red-light sensitized hole-conducting polymer for energy conversion." *Physical Chemistry Chemical Physics* 23, no. 33 (2021): 18026-18034.

2. Węcławski, Marek K., Marie Jakešová, Martyna Charyton, Nicola Demitri, Beata Koszarna, Kerstin Oppelt, Serdar Sariciftci, Daniel T. Gryko, and Eric Daniel Głowacki. "Biscoumarin-containing acenes as stable organic semiconductors for photocatalytic oxygen reduction to hydrogen peroxide." *Journal of Materials Chemistry A* 5, no. 39 (2017): 20780-20788.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VIII-241-P ***PROPIEDADES FÍSICAS DE POLÍMEROS SUPRAMOLECULARES AMIGABLES CON EL AGUA DE CMC CON ISÓMEROS DE CARBOXIFENILMALEIMIDAS***

Desarrollo de Nanopartículas de Melanina Funcionalizadas con Quercetina para su aplicación en terapia dual.

Ana V. Luna[1];J Alejandro Arboleda-Murillo[2]; Diana Blach[1]; Cristian C. Villa[1]*

1. Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías, Universidad del Quindío
2. Grupo de Investigación en Fisicoquímica Ambiental y Computacional, Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías, Universidad del Quindío.

* Autor de correspondencia: ccvilla@uniquindio.edu.co

Palabras clave: melanina; quercetina; nanopartículas; terapia fototérmica; inactivación fotodinámica.

Uno de los principales problemas que afronta la humanidad es la creciente resistencia de los microorganismos a los tratamientos antibióticos tradicionales, por lo que ha surgido la necesidad de crear nuevos tratamientos como la terapia fototérmica y la inactivación fotodinámica. En la primera materiales como las nanopartículas de melanina (MelNPs) son excitadas utilizando radiación infrarroja generando un rápido calentamiento que lleva a la muerte celular. En la segunda, molecular como la quercetina (Quer) es excitada utilizando luz visible para generar especies radicalarias de oxígeno (ROS) que son tóxicas para los microrganismos. El objetivo de este estudio fue formar un sistema dual Quer-MelNPs que pueda ser utilizado tanto en terapia fototérmica e inactivación fotodinámica frente a microrganismos. Los materiales fueron sintetizados por nanoprecipitación seguidos por una funcionalización y fueron caracterizados mediante espectroscopias FTIR, UV-Vis, Raman y de fluorescencia, además de microscopía SEM. Esta caracterización permitió una correcta unión entre las nanopartículas y las moléculas de Quer. Finalmente se observó que al ser iluminadas con luz infrarroja hay un calentamiento de los materiales superior a 5 °C, mientras que al ser iluminadas con luz azul (450 nm) se generan peróxidos.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Diseño teórico de una forma farmacéutica con perfil de liberación controlado.

Juan C. Morales[a], Juan D. Mendez[a] y Carlos A. Arango[a,*].

[a] Departamento de Ciencias Farmacéutica y Químicas, Universidad Icesi, Colombia.

** Autor de correspondencia: caarango@icesi.edu.co*

Palabras Claves: Hinchamiento; erosión; tableta; forma farmacéutica; liberación controlada.

El diseño de formulaciones farmacéuticas que posibiliten la liberación regulada de principios activos se erige como un objetivo central dentro del campo de la fisicoquímica farmacéutica. Específicamente, el esquema terapéutico de individuos sometidos a tratamientos polifármacos podría simplificarse mediante la administración de fármacos con dosificación menos frecuente, lo cual deviene de la creación de perfiles de liberación adecuadamente diseñados.

El paradigma de la liberación de principios activos desde formas farmacéuticas halla fundamentos en la segunda Ley de Fick. La evolución de una tableta tras su ingestión es orquestada por una serie de procesos fisicoquímicos interconectados. Primero, se verifica una etapa de hidratación que induce un aumento en las dimensiones de la tableta. Posteriormente, acontece la migración gradual de componentes desde la matriz hacia el medio circundante. Finalmente, la tableta experimenta un proceso de erosión culminando en su desintegración.

En aras de modelar este fenómeno, la formulación matemática y resolución numérica o analítica de la ecuación diferencial parcial que encarna la segunda Ley de Fick se convierte en recurso ineludible. Paralelamente, los modelos teóricos actuales suelen postular una interfaz estática entre la matriz y el entorno, ignorando fenómenos trascendentales como el fenómeno de hinchamiento y el proceso de erosión.

En este contexto, el presente proyecto erige su fundamento en investigaciones antecedentes lideradas por Natalia Velásquez de la Universidad Icesi. El objetivo radicó en ampliar este enfoque, incorporando las condiciones de transversalidad omitidas previamente. Particularmente, se integranron los procesos de hinchamiento y erosión en la ecuación diferencial parcial que subyace a la Ley de Fick, bajo un marco que contempla condiciones de frontera móviles.

El ajuste paramétrico derivado de estos fenómenos permite la obtención de simulaciones que se asemejan a los perfiles de liberación inherentes a las formulaciones farmacéuticas auténticas. Como producto deseado, se procura la derivación de una función que caracterice la concentración dentro de la matriz que se ajustará para adecuarse a las limitaciones inherentes a la manufactura en la industria farmacéutica Vallecaucana.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VIII-398-P ***DISEÑO TEÓRICO DE UNA FORMA FARMACÉUTICA CON PERFIL DE LIBERACIÓN CONTROLADO.***

Diseño teórico de una forma farmacéutica con perfil de liberación controlado.

Juan C. Morales[a], Juan D. Mendez[a] y Carlos A. Arango[a,*].

[a] Departamento de Ciencias Farmacéutica y Químicas, Universidad Icesi, Colombia.
** Autor de correspondencia: caarango@icesi.edu.co*

Palabras Claves: Hinchamiento; erosión; tableta; forma farmacéutica; liberación controlada.

El diseño de formulaciones farmacéuticas que posibiliten la liberación regulada de principios activos se erige como un objetivo central dentro del campo de la fisicoquímica farmacéutica. Específicamente, el esquema terapéutico de individuos sometidos a tratamientos polifármacos podría simplificarse mediante la administración de fármacos con dosificación menos frecuente, lo cual deviene de la creación de perfiles de liberación adecuadamente diseñados.

El paradigma de la liberación de principios activos desde formas farmacéuticas halla fundamentos en la segunda Ley de Fick. La evolución de una tableta tras su ingestión es orquestada por una serie de procesos fisicoquímicos interconectados. Primero, se verifica una etapa de hidratación que induce un aumento en las dimensiones de la tableta. Posteriormente, acontece la migración gradual de componentes desde la matriz hacia el medio circundante. Finalmente, la tableta experimenta un proceso de erosión culminando en su desintegración.

En aras de modelar este fenómeno, la formulación matemática y resolución numérica o analítica de la ecuación diferencial parcial que encarna la segunda Ley de Fick se convierte en recurso ineludible. Paralelamente, los modelos teóricos actuales suelen postular una interfaz estática entre la matriz y el entorno, ignorando fenómenos trascendentales como el fenómeno de hinchamiento y el proceso de erosión.

En este contexto, el presente proyecto erige su fundamento en investigaciones antecedentes lideradas por Natalia Velásquez de la Universidad Icesi. El objetivo radicó en ampliar este enfoque, incorporando las condiciones de transversalidad omitidas previamente. Particularmente, se integranron los procesos de hinchamiento y erosión en la ecuación diferencial parcial que subyace a la Ley de Fick, bajo un marco que contempla condiciones de frontera móviles.

El ajuste paramétrico derivado de estos fenómenos permite la obtención de simulaciones que se asemejan a los perfiles de liberación inherentes a las formulaciones farmacéuticas auténticas. Como producto deseado, se procura la derivación de una función que caracterice la concentración dentro de la matriz que se ajustará para adecuarse a las limitaciones inherentes a la manufactura en la industria farmacéutica Vallecaucana.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VIII-519-P ***EFECTO DE LOS RESORCINA[4]ARENOS SOBRE LA ACTIVIDAD ENZIMÁTICA DE LA CASA DE ASPERGILLUS SP. EN MEZCLA DE SOLVENTES.***

Efecto de los Resorcin[4]arenos Sobre la Actividad Enzimática de Lacasa de *Aspergillus Sp.* en Mezcla de Solventes

Karen Segura*, Edgar F. Vargas

Laboratorio de Termodinámica de Soluciones, Departamento de Química, Universidad de los Andes, Bogotá D.C., Colombia

k.segura@uniandes.edu.co

En este trabajo, se determinó la actividad enzimática de la Lacasa de *Aspergillus sp.* sobre 130uM sustrato guayacol en solución acuosa utilizando buffer de fosfato salino (PBS), pH 7. También se realizó la caracterización de la enzima mediante la determinación de los parámetros cinéticos de la degradación del guayacol y los resultados obtenidos fueron comparados con la literatura. Posteriormente, se determinó la actividad enzimática de la Lacasa sobre 130uM sustrato guayacol en presencia de dodecilsulfato de sodio (SDS) y el C-metilresorcin[4]areno tetraminoetilado (TAE) y el cloruro de C-etilresorcin[4]areno tretaminometilado (ETAM). Adicionalmente, se estudió el efecto de la concentración de solvente sobre la actividad de la enzima mediante la evaluación de la actividad enzimática de la Lacasa sobre 250uM sustrato guayacol en la mezcla binaria que contenía 50, 60 y 70% v/v de 1-propanol - PBS. Por último, se determinó el efecto de nueve resorcinarenos sobre la actividad de la Lacasa, en una mezcla de solventes constituida por PBS-1-propanol 50%v/v. En este estudio se encontró que la enzima Lacasa de *Aspergillus sp.* tiene una alta afinidad por el guayacol, como también una alta eficiencia catalítica. Adicionalmente, el aumento de la concentración de solvente tiene un efecto inhibitorio sobre la actividad de la Lacasa.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

PETROQUÍMICA Y GEOQUÍMICA

XVI-32-P ***CARACTERIZACIÓN FISICOQUÍMICA DE AGUAS SUPERFICIALES EN COLOMBIA ASOCIADAS A MUESTRAS DE SEDIMENTOS DE LLANURA DE INUNDACIÓN.***

Caracterización Fisicoquímica de Aguas Superficiales en Colombia Asociadas a Muestras de Sedimentos de Llanura de Inundación.

Omar H. Mendoza [a], **Leonardo Ceballos** [a], ***Johanna Duarte** [a], **Ismael E. Moyano** [a], **Juanita Sierra** [a].

**Autor de correspondencia:* joduarte@sgc.gov.co

[a] *Servicio Geológico Colombiano, Colombia*

Palabras Clave: aguas superficiales; geoquímica; sedimento de llanura de inundación; cloruros; sulfatos.

Resumen:

El Servicio Geológico Colombiano (SGC), a través de la Dirección de Recursos Minerales, siguiendo protocolos institucionales para muestreo de aguas superficiales, capturó información hidroquímica entre los años 2018 a 2022, en diferentes cuencas hidrográficas del territorio colombiano, realizando un cubrimiento espacial en todo el país. El proyecto, denominado "Mapeo Geoquímico de Ultrabaja Densidad en Colombia", tuvo como objetivo caracterizar la composición geoquímica de las cuencas hidrográficas de orden superior a 250 km^2 en el territorio nacional mediante el análisis de dos medios naturales: aguas superficiales y muestra asociada de sedimento de llanura de inundación. Las muestras de agua colectadas fueron analizadas en el laboratorio de Aguas y Gases del SGC. Los datos hidroquímicos obtenidos fueron ubicados espacialmente y se analizó la relación de la composición del agua con la respectiva litología y/o afectación antrópica a su naturaleza. En este trabajo se evalúa la información de pH, alcalinidad, conductividad, concentración de cloruros, bicarbonatos, sulfatos, sodio, potasio, magnesio y calcio, para realizar una aproximación al entendimiento de la composición del agua y sus relaciones con algunos parámetros de la cuenca y su entorno, como son la geología, vegetación, pluviosidad, e intervención humana.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

PRODUCTOS NATURALES

IX-41-P ***CARACTERIZACIÓN QUÍMICA DE LOS ÁCIDOS GRASOS Y ACTIVIDADES BACTERICIDA Y ANTIOXIDANTE DEL CALAMAR LOLLIGUNCULA BREVIS (BLAINVILLE, 1823)***

Caracterización Química de los Ácidos Grasos y Actividades Bactericida y Antioxidante del Calamar *Lolliguncula brevis* (Blainville, 1823)

Juan A Rivero [a*], **Gilmar G Santafé** [a], **Jorge A Quirós** [a], **Orfa I Contreras** [a]

[a] *Laboratorio Química de los Productos Naturales, Universidad de Córdoba, Colombia*

* *Autor de correspondencia: jriveroarrieta50@correo.unicordoba.edu.co*

Palabras Claves: *Lolliguncula brevis*; Ácidos grasos; Actividad bactericida; Actividad antioxidante; Bahía de Cispatá.

Actualmente, los océanos cubren las tres cuartas partes de la superficie terrestre; de acuerdo con fuentes bibliográficas, su fauna y flora constituyen una fuente prometedora de nuevos compuestos químicos con potencial terapéutico. Como parte de este gran mundo marino, los cefalópodos, son un grupo de especies que han sido objeto de estudio, principalmente debido a la secreción de tinta como mecanismo de defensa; dentro de ellos, el calamar *Lolliguncula brevis* es una especie con escasos estudios referentes a su composición química o de actividades biológicas, por ello surge el interés de identificar sus metabolitos secundarios y evaluar su potencial antioxidante y bactericida. Los especímenes de *L. brevis* fueron recolectados en la bahía de Cispatá, Córdoba; sometidos a maceración en frío con etanol y concentrados a presión reducida obteniendo el extracto primario, al cual se le evaluó su actividad antioxidante empleando los métodos DPPH$^{\cdot}$ y ABTS$^{+\cdot}$, y su actividad bactericida utilizando el método de microdilución frente a aislamientos clínicos de bacterias grampositivas y gramnegativas. A partir de la aplicación de técnicas cromatográficas se logró la separación de la fracción lipídica del extracto, donde los ácidos grasos fueron derivatizados hasta los correspondientes ésteres metílicos. El análisis de los espectros obtenidos mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas, permitió identificar 24 ácidos grasos, los cuales mostraron variedad en su estructura química con referencia a la longitud de las cadenas carbonadas y su grado de insaturación, destacándose la gran concentración de ácidos hexadecanoico y docosahexaenoico (DHA). El extracto etanólico mostró una significativa capacidad antioxidante con valores de IC_{50} 795,33 y 25,38 ppm para las metodologías DPPH$^{\cdot}$ y ABTS$^{+\cdot}$ respectivamente. Con referencia a la actividad bactericida, se observó una inhibición del crecimiento del 77,22% a la menor concentración evaluada (156,25µg/mL) frente *S. aureus*, mientras que *P. aeruginosa* presentó una fuerte resistencia a las distintas concentraciones evaluadas. De los resultados obtenidos se puede concluir que los compuestos químicos presentes en el extracto etanólico de *L. brevis* exhibieron propiedades promisorias desde el punto de vista de su capacidad bactericida y antioxidante.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Caracterización Fisicoquímica Del Fruto De La Grosella (*Phyllanthus Acidus*) Cultivada En El Suroccidente De Colombia

Juan J. Tobar [a]*, **Luis A. Lenis** [a], **Olga L. Hoyos** [a]

[a] *Grupo de Investigación en Química en Productos Naturales (QPN), Universidad del Cauca, Colombia*
** Autor de correspondencia: juanjo@unicauca.edu.co*

Palabras Claves: Fruta; Grosella; *Phyllanthus acidus*, Actividad Antioxidante.

La grosella (*Phyllanthus acidus*) es una fruta que se conoce por su consumo a nivel mundial tanto en fresco como en productos derivados (infusiones, mermeladas, etc), aprovechando su composición rica en compuestos fenólicos y acido ascórbico, lo que le confiere propiedades antioxidantes benéficas para la salud. En Colombia, se ha establecido su presencia en algunos departamentos; sin embargo, en el país su consumo es mayoritariamente en fresco y de manera ocasional, debido a que no hay tecnificación en su cultivo y generalmente, el árbol aparece ornamentalmente en patios de casas o distribuido aleatoriamente en fincas. Esto se debe, en parte, al poco conocimiento científico que se tiene sobre sus propiedades fisicoquímicas, organolépticas y nutricionales, lo que no ha fomentado su desarrollo y está provocando una tendencia a la reducción de esta especie en el entorno natural.

Dentro de este contexto, fue necesario estudiar la composición nutricional y las propiedades nutraceúticas de la grosella, con el fin de promover su cultivo y consumo, así como la formulación de nuevos productos, dándole un valor agregado para garantizar su preservación. Para ello, en esta investigación se planteó establecer las características fisicoquímicas, organolépticas y propiedades antioxidantes de la grosella (*Phyllanthus Acidus*) en muestras del suroccidente colombiano (Cauca-Valle del Cauca), para ello se analizaron parámetros como: humedad, cenizas, proteína, extracto etéreo, grasa bruta, extracto no nitrogenado, de igual forma se evaluó el contenido total de polifenoles, flavonoides y actividad antioxidante por el método de DPPH, obteniéndose los resultados condensados en la **Tabla 1**. Todos estos resultados nos sirven de punto de partida para continuar con el estudio de esta fruta, gracias a que se observa características fisicoquímicas y antioxidantes favorables, que lo catapultan como un alimento funcional.

Tabla 1. Características fisicoquímicas, contenido total de compuestos fenólicos, flavonoides y actividad antioxidante del fruto de *P. cidus*

PARÁMETRO	GUACHENE (Cauca)	ROZO (Valle del Cauca)	PATIA (Cauca)
Humedad (g/100g)	90,45	90,07	89,95
Cenizas (g/100g)	0,63	0,57	0,59
Proteína (g/100g)	4,59	4,44	5,22
Grasa (g/100g)	0,26	0,36	0,31
Fibra (g/100g)	1,45	1,27	1,32
ENN* (g/100g)	2,62	3,29	2,61
Pectina (g/100g)	0,35	0,31	0,34
Acidez Titulable (%)	3,60	3,56	3,59
pH	3,13	2,89	3,97
Vitamina C (mg/100g)	-----	42,73	54,15
Contenido de Fenoles totales [mg Ac. Gálico/g muestra]	$3{,}28*10^{-3}$	$4{,}43*10^{-3}$	$3{,}61*10^{-3}$
Contenido de Flavonoides [mg Quercetina/g muestra]	0,096	0,164	0,199
Actividad Antioxidante IC_{50}** (µg/ml)	3,72	7,15	7,76

*Extracto No Nitrogenado

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

** Valor IC_{50} del extracto metanólico de la fruta de *P. Acidus*

IX-48-P ***EVALUACIÓN ANTIFÚNGICA DE PRODUCTOS SEMISINTÉTICOS DE PIPER CUMANENSE Y AVANCES EN LA MODIFICACIÓN POR REACCIONES MULTICOMPONENTES EN EL EXTRACTO ETANÓLICO***

Evaluación antifúngica de productos semisintéticos de *Piper cumanense* y avances en la modificación por reacciones multicomponentes en el extracto etanólico

Nicolás Ustariz Rodríguez *[a], Geraldine T. Sánchez Villalba [a], Daniel Ernesto Vicentes Pérez [a] y Jorge Emilio Parra Amin [a]

[a] Facultad de Ciencias, Universidad de Ciencias Aplicadas y Ambientales, Bogotá 111166, Colombia

*Autor de Correspondencia: nustariz@udca.edu.co

Palabras clave: *Piper cumanense*; Actividad Antifúngica; Síntesis Multicomponentes; *F.oxysporum*.

Las matrices vegetales son fuentes de nuevos compuestos activos biológicamente, los cuales son aislados y purificados por metodologías tradicionales a partir de extractos vegetales. Del extracto etanólico de *Piper cumanense* de tallos e inflorescencias, se realizó el fraccionamiento por medio de un cromatógrafo flash con una columna SNAP-KP y una fase móvil de DCM:AcOMe en un gradiente de polaridad de 0 a 100%, obteniendo compuestos fenólicos [1].

Posteriormente a los compuestos obtenidos se les realizó modificaciones estructurales por medio de reacciones de metilación, lo cual permitió obtener derivados de estos compuestos naturales aislados, a los que se les determinó la concentración ihnibitoria 50 frente al hongo fitopatógeno *Fusarium oxysporum* (causante de la enfermedad de marchitamiento vascular en plantas), encontrando valores de 34,5 y 38,7 □M muy similares comparados con el agroquímico sintético usado por los agricultores. [2]

Lo antes descrito se realizó bajo una metodología clásica de aislamiento, purificación, identificación y comprobación de actividad biológica, sin embargo, es posible el empleo nuevas rutas sintéticas, en donde se cambie el orden clásico de derivatización posterior a la purificación de un compuesto natural, con lo cual por medio de una reacción multicomponente directamente en la matriz de un extracto vegetal es posible obtener un híbrido de producto natural para que posteriormente se aísle, purifique e identifique.

De esta manera se cuantificó la cantidad de componentes carbonílicos en el extracto etanólico de *P. cumanense* mediante la formación de hidrazonas y su posterior evaluación por espectroscopía UV[3]. Una vez determinada la cantidad de carbonilos, se prosigue con la reacción multicomponentes en la matriz y posteriores etapas de extracción, purificación. De esta manera se puede llegar a una nueva ruta sintética que aumente la cantidad de moléculas aisladas del extracto etanólico de *P. cumanense* con posible actividad antifúngica.

Mediante esta metodología se realiza de forma más eficiente, el seguimiento por TLC, posterior aislamiento y purificación de compuestos híbridos de una reacción multicomponente del extracto etanólico, además de que permite ampliar la cantidad de componentes obtenidos como híbridos de productos naturales.

BIBLIOGRAFÍA

1. Parra Amin, J. E., Cuca, L. E., & González-Coloma, A. (2021). Antifungal and phytotoxic activity of benzoic acid derivatives from inflorescences of Piper cumanense. *Natural product research*, *35*(16), 2763-2771.

2. Motta Camero, M. G. (2023). Caracterización de actividad antifúngica de compuestos derivados del ácido benzoico en inflorescencias de Piper Cumanense.

3. Tomohara, K., Ohashi, N., Uchida, T., & Nose, T. (2022). Synthesis of natural product hybrids by the Ugi reaction in complex media containing plant extracts. *Scientific reports*, *12*(1), 15568.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Optimización de Síntesis del Lactato De Mentilo Biocatalizada Por Novozym 435®

Marino Chavarro Cordoba[a],* **Ricardo Benitez Benitez**[a], **Jeyson C. Mitte** [a]

[a] *Química de Productos Naturales (QPN), Universidad del Cauca, Colombia.*
** Autor de correspondencia: rbenitez@unicauca.edu.co*

Palabras Claves: Lipasa inmovilizada; Ester de mentol; Síntesis verde; libre de solvente, dl-mentol

Para el sector cosmético, farmacéutico y de alimento, han sido afectados por eventos globales (guerra en ucrania y inestabilidad de la economía global), genero un alza en los precios de las importaciones de materia prima para la maquinación de productos, se ha visto la necesidad de generar en el país cierto tipo de materias primas como es el caso del lactato de mentilo, de gran uso en el sector cosmético y de alimentos en Colombia. El objetivo de esta investigación determinar las condiciones óptimas la síntesis del lactato de mentilo usando la enzima Novozym 435®. Este estudio se centra en la síntesis enzimática del lactato de mentilo, variando concentración de los sustratos (1-3 en base a mentol), carga enzimática (5-50 % en base al mentol), tiempo (1-12 h) y temperatura(60-120°C), debido al punto de fusión del mentol y el ácido láctico están por debajo de 40 °C no requiere solventes. El seguimiento de la reacción se realiza mediante GC-MS (figura 1), además de la caracterización por espectroscopia IR, los resultados obtenidos al momento demuestran la formación del compuesto de interés, evidenciado por las bandas características del enlace C=O (figura 1) y su peso molecular esto soportado por la cromatografía de gases-masas. El uso de la enzima Novozym 435®, para realizar la esterificación del mentol y el ácido láctico ha sido exitosa ya que mediante diversos ensayos se han obtenido la presencia del producto de interés en este caso el lactato de mentilo, también se observó que al someter a bajas temperaturas el crudo de reacción y retomar a la temperatura ambiente retornar a ser un líquido por lo cual hay la posibilidad de generar la síntesis in situ de solventes eutécticos a base de mentol.

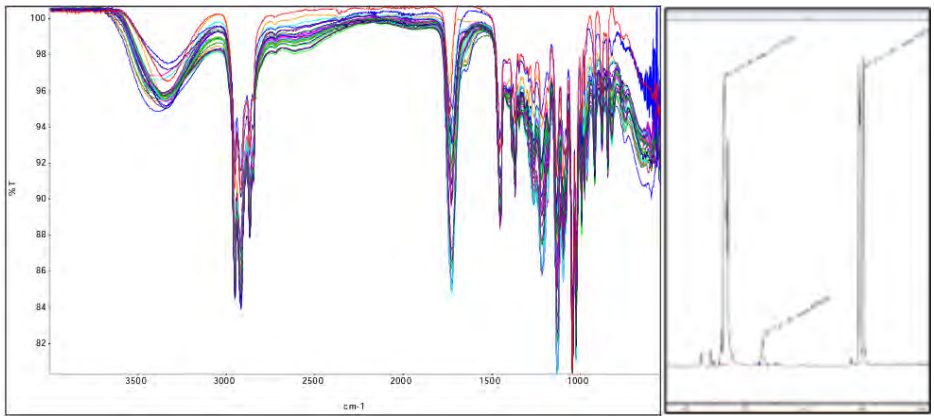


Figura 1. Espectros FT-IR del diseño experimental (izquierda) y cromatograma de crudo de reacción (derecha)

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-50-P ***PERFIL FITOQUÍMICO Y ACTIVIDAD BIOLÓGICA DE EXTRACTOS DE DIFERENTE POLARIDAD DE LA CORTEZA DE RHIZOPHORA MANGLE EN DOS COMPLEJOS CENAGOSOS DEL CARIBE COLOMBIANO***

Perfil Fitoquímico y Actividad Biológica de Extractos de Diferente Polaridad de la Corteza de *Rhizophora mangle* en dos Complejos Cenagosos del Caribe Colombiano

Angel Olivera[a], Cristobal Caicedo[a], Dary Mendoza[a*]

[a] *Grupo de Investigación Productos Naturales y Bioquímica de Macromoléculas, Universidad del Atlántico, Colombia.*
* *Dary Mendoza: darymendoza@mail.uniatlantico.edu.co*

Palabras Claves: *Rhizophora mangle*; *metabolitos secundarios; cribado fitoquímico; actividad citotóxica*

Rhizophora mangle es un árbol grande que se encuentra en las zonas cenagosas tropicales. Esta especie es reconocida por sus usos etnobotánicos, en el tratamiento de la tuberculosis, asma y úlceras; también se le atribuyen propiedades cicatrizantes y citotóxicas. No obstante, es poca la información científica sobre los especímenes cultivados en el caribe colombiano. El propósito del estudio fue determinar el perfil fitoquímico de extractos de diferente polaridad de la corteza de *R. mangle* colectada en la Ciénaga de Mallorquín departamento del Atlántico (CM) y la Ciénaga de la Virgen departamento de Bolívar (CV). También, se determinó la actividad antioxidante mediante ensayo DPPH y la actividad citotóxica mediante ensayo MTT.
Se detectaron lactonas terpénicas, triterpenos, saponinas, taninos, compuestos fenólicos y flavonoides en la corteza de *R. mangle*. El mayor contenido de compuestos fenólicos y flavonoides se presentó en extractos metanólicos y etanólicos de CV (71,55 µg EAG±22,80/g corteza y 49,15±6,07 µg ECat/g corteza, respectivamente). Análisis cromatográfico por HPLC-DAD identificó quercetina, catequina y ácido clorogénico en estos extractos. La mayor actividad antioxidante, representada en % inhibición del radical DPPH, se presentó en extractos de acetona (CV = 58,63±13,28%; CM = 54,87±9,32%) y acetato de etilo (CV = 67,01±7,38%; CM = 67,08±12,61%) a la concentración de 0,1 mg/mL. Análisis por CG-EM reveló la siguiente composición química en extractos clorofórmicos de la corteza de *R. mangle*: ésteres metílicos de ácidos grasos (cantidad relativa > 82%), α-amirina (8,1%), vitamina E (5,0%), □-sitosterol (3,3%), lupeol (2,2%) y escualeno (0,42%). También, se detectaron ftalato de di-butilo y ftalato de bis(2-etilhexilo) en *R. mangle* de la CM, este hallazgo es un indicador de contaminación de la ciénaga con plásticos. El extracto en acetona de CV (25 µg/mL) mostró mejores resultados en la prueba de citotoxicidad, viabilidad del 72,0% y 74,6% en células tumorales de hígado (HepG2) y colon (SW480), sin efecto citotóxico en fibroblastos no tumorales de ratón (L929). Los resultados obtenidos aportan al conocimiento de la composición química de la corteza de *R. mangle* cultivada en el caribe colombiano y su uso potencial como fuente de biomoléculas con actividad antioxidante y citotóxica de células tumorales.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-51-P ***ESTABLECIMIENTO DE UN SISTEMA PREPARATIVO PARA LA PURIFICACIÓN DE TRITERPENOS PENTACÍCLICOS ÁCIDOS OBTENIDOS DE CECROPIA SP.***

Establecimiento de un Sistema Preparativo para la Purificación de Triterpenos Pentacíclicos Ácidos Obtenidos de *Cecropia sp*.

Rafael A. Gómez [a]; Guillermo L. Montoya[a]*

[a] *Facultad de Ingeniería, Diseño y ciencias Aplicadas. Escuela de Ciencias Aplicadas e Industria Sostenible, Departamento de Ciencias Farmacéuticas y Químicas. Universidad Icesi, Cali, Valle del Cauca, Colombia.*
glmontoya@icesi.edu.co

Palabras Claves: Cromatografía preparativa; Triterpenos; Espectrometría de masas; Cecropia

Fracciones ricas en Triterpenos Pentacíclicos Ácidos (TPAs) producidas por plantas del género *Cecropia* pueden inhibir la enzima 11β-hidroxiesteroide deshidrogenasa tipo 1 y ser una alternativa de tratamiento para la diabetes tipo 2[1]. Algunos de estos TPAs solo han sido reportados en las plantas de dicho género[2], por lo que adquirir estándares de estas moléculas es muy complejo y se hace necesario obtenerlos desde extractos purificados. Los estándares de los TPAs permitirán estandarizar los extractos obtenidos del material vegetal y evaluar su potencial de manera individual.

Los procesos de extracción del material vegetal ya han sido descritos anteriormente[1-4]. El material resultante correspondiente a una fracción rica en TPAs fue empleado para evaluar sistemas de separación por cromatografía de baja presión en el equipo de Biotage® Isolera One™ para establecer un protocolo estandarizado y reproducible. El análisis cualitativo se realizó por cromatografía planar y por espectrometría de masas con ionización por electrospray en modo negativo.

El proceso experimental permitió generar una metodología por cromatografía en fase reversa que, empleando una columna C18 comercial, procesa 100 mg de extracto de material vegetal (por cada corrida cromatográfica) y lo separa en 7 fracciones. De estas, una fracción contiene un único TPA con m/z de 471; otra fracción contiene dos TPAs con valor de m/z de 455 y 471; otra fracción contiene dos TPAs con m/z de 469 y 487, siendo este último de mayor abundancia relativa y correlacionado con el ácido yarúmico[2] o isómeros del mismo.

Dadas las condiciones experimentales seleccionadas para este sistema, se ha podido reproducir la purificación de extractos de material vegetal equivalente manteniendo los perfiles cromatográficos de cada fracción. Por esto, se prevé que esta metodología sea adecuada para la generación de stock de algunos de los TPAs presentes en los extractos, y como punto de partida para las demás moléculas de interés.

Referencias

1. Mosquera, C., Panay, A. & Montoya, G. Pentacyclic Triterpenes from Cecropia telenitida Can Function as Inhibitors of 11β-Hydroxysteroid Dehydrogenase Type 1. *Molecules* 23, 1444 (2018).
2. Peláez, G. L. M., Sierra, J. A., Alzate, F., Holzgrabe, U. & Ramirez-Pineda, J. R.. Pentacyclic triterpenes from Cecropia telenitida with immunomodulatory activity on dendritic cells. *Rev. bras. farmacogn.* 23, 754–761 (2013).
3. Aristizábal, V. & Montoya, G. Descubrimiento de una fracción química a partir de hojas y raíces de Cecropia angustifolia con potencial inhibitorio sobre 11β-HSD1. http://repository.icesi.edu.co/biblioteca_digital/handle/10906/84538.
4. Blanco, A. & Montoya, G. Descubrimiento de una fracción química a partir de hojas y raíces de Cecropia telenitida con potencial inhibitorio sobre 11β-HSD1.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-52-P ***DETERMINACIÓN DE LOS METABOLITOS SECUNDARIOS DE HOLOTHURIA ARENICOLA Y EVALUACIÓN DE SU ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE Y ANTIMICROBIANA***

Determinación De Los Metabolitos Secundarios De *Holothuria arenicola* Y Evaluación De Su Actividad Antioxidante Y Antimicrobiana

Ingrid D. Martínez[a], Gilmar G. Santafé *[a], Orfa I. Contreras [a], Jorge A. Quirós [a].

[a] *Laboratorio de Química de los Productos Naturales, Universidad de Córdoba, Colombia.*
** Autor de correspondencia: gsantafe@correo.unicordoba.edu.co*

Palabras Claves: pepino de mar; *Holothuria arenícola*; ácidos grasos; compuestos bioactivos; Bahía de Cispatá.

Los invertebrados marinos son grandes productores de metabolitos secundarios con diversas estructuras, en su mayoría producidos para supervivencia de las especies como mecanismo de defensa o por las condiciones ecológicas de su hábitat como temperatura, pH, salinidad o relaciones simbióticas. Numerosas investigaciones han demostrado que estos organismos poseen moléculas que tienen diferentes tipos de actividades biológicas. En numerosas fuentes bibliográficas se informa acerca de la aplicabilidad y eficiencia de algunos compuestos bioactivos, sin embargo, la búsqueda de información acerca de los niveles de estas actividades y de los compuestos responsables aún constituye un relevante y amplio campo de estudio. En este trabajo, dándole continuidad a investigaciones anteriores se abordó el filo equinodermo, particularmente el pepino de mar *Holothuria arenícola* encontrando datos acerca de su composición química y actividad biológica. Se identificaron sus metabolitos secundarios mayoritarios evaluando su potencial antioxidante y antimicrobiano. Los ejemplares estudiados de *H. arenicola* fueron recolectados en la Bahía de Cispatá, Córdoba, sometidos a extracción con etanol por el método de maceración en frío, posteriormente se destiló a presión reducida obteniendo el correspondiente extracto etanólico. Después de aplicar procesos cromatográficos se obtuvieron diferentes fracciones, en este caso, a la de menor polaridad se le determinó su composición química mediante GC-MS identificando 23 ácidos grasos y tres compuestos cetónicos. Los ácidos grasos mostraron variedad estructural con relación a la longitud de las cadenas carbonadas (C_{13}-C_{30}) y algunos con ramificaciones determinadas por la posición de un grupo metilo, destacándose las mayores concentraciones de los ácidos octadecanoico, hexadecanoico, eicosanoico y docosanoico. El análisis de la evaluación antioxidante realizada al extracto etanólico y desarrollada por el método del radical DPPH· mostró que su mayor actividad fue de 62.7% a 2.200 µg / ml de concentración, con un IC50 de 1.556 µg/ml indicando una actividad antioxidante significativa. Por su parte, la actividad antimicrobiana, desarrollada mediante la técnica de microdilución, mostró reducción del crecimiento bacteriano del 93,32% a 156,25µg/mL de concentración frente a *E. faecium* con un IC90 = 1.478 µg/mL; y para aislados fúngicos una inhibición de 101.1% a 5000 µg / ml, frente a *C. tropicalis* con un IC90 =3.380µg/mL. De los resultados obtenidos se concluye que los metabolitos secundarios presentes en *H. arenicola*, pueden considerarse como promisorios con referencia a su capacidad antioxidante y antimicrobiana.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Actividad Acaricida de Sustancias Provenientes de Aceites Esenciales para el Control de la Garrapata *Rhipicephalus Microplus*

Liliana M. Becerra*[a], Andrés G. Sierra[b], Marcela J. Suárez[c], Juliet A. Prieto[d], Oscar J. Patiño[e]

[a] *Semillero de investigación en detección e identificación en compuestos de interés farmacéutico SIDEMIF, Universidad El Bosque, Colombia:*
[b] *Chemistry of Natural Bioactive Plant Products Research Group (QuiProNaB), Colombia*
[c] *Grupo Spagyria, Unilabs asesoría e investigación SAS. Colombia*
[d] *Phytochemical Javerian University research group (GIFUJ), Pontificia Universidad Javeriana, Colombia*
[e] *Chemistry of Natural Bioactive Plant Products Research Group (QuiProNaB), Colombia*

**Autor de correspondencia: lbecerraf@unbosque.edu.co*

Palabras claves: aceites esenciales; garrapatas; *Rhipicephalus Microplus;* acaricidas.

Las garrapatas son ectoparásitos de importancia en áreas de explotación pecuaria debido a la la afectación que tienen sobre el ganado generando pérdidas económicas y calidad en los productos derivados. Como método de control se usan compuestos sintéticos, los cuales tienen como desventajas elevado costo, creciente resistencia y alta toxicidad. Esto ha hecho que se intensifique la búsqueda y desarrollo de nuevas sustancias que sean seguras para el control de la garrapata común del ganado, siendo los aceites esenciales una fuente potencial para encontrar sustancias aplicables en este campo debido a la diversidad de metabolitos secundarios que se pueden encontrar. **Materiales y métodos:** Durante la investigación se obtuvieron diferentes aceites esenciales en donde la composición química fue evaluada mediante CG/MS. La actividad acaricida de los aceites fue evaluada mediante la metodología de inmersión usando garrapatas ingurgitadas de *Rhipicephalus Microplus*. **Resultados y discusión**: Cuatro aceites esenciales superaron una mortalidad de las garrapatas del 70%, posteriormente se evaluó la actividad acaricida de algunos componentes mayoritarios; como el *D*-limoneno y *R*-pulegona, siendo el de mayor actividad *R*-pulegona, con una mortalidad del 76%; por último se hicieron algunas modificaciones estructurales en el grupo funcional cetona y el doble enlace de la pulegona encontrando disminución en la actividad acaricida a alrededor del 46%, sugiriendo que estos grupos funcionales pueden ser los responsables de esta actividad acaricida. **Conclusión:** Se destaca el potencial de los aceites esenciales como agentes acaricidas, lo que permite plantear alternativa para el control de esta plaga.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-55-P ***SEMI-SÍNTESIS, PURIFICACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE BETAXANTINAS, A PARTIR DE EXTRACTOS DEL FRUTO OPUNTIA DILLENII Y EVALUACIÓN DE SU CAPACIDAD ANTIRADICAL***

Semi-síntesis, Purificación y Caracterización de Betaxantinas, a partir de Extractos del Fruto *opuntia dillenii* y evaluación de su capacidad antiradical.

Neyder A. Checa[a]*, Silvia Cruz[a], Nelson Hurtado[a]

[a] *Grupo de investigación en Productos de Importancia Biológica (GIPIB), Universidad de Nariño, Colombia.*
** neyder013@gmail.com*

Palabras Claves: Ácido betalámico; actividad antioxidante; betaxantinas; HPLC; semi- síntesis.

Se implementó un procedimiento de semi-síntesis de betaxantinas a partir del ácido betalámico (AB) el cual se aisló por hidrólisis de las betalaínas del fruto de la especie *Opuntia dillenii* con una posterior condensación del ácido con L-aminoácidos. Estudios previos (Betancur, 2017) confirmaron en la matriz la presencia de 17 compuestos del tipo polifenoles y betalaínas; por lo tanto, previo a la semi-síntesis se desarrolló un protocolo de purificación y fraccionamiento de estos compuestos por cromatografía en columna (soporte sólido Amberlita XAD-7 y C18). Así, el Ácido Betalámico necesario para la semisíntesis se obtuvo mediante hidrólisis básica de la fracción rica en betacianinas, el cual fue purificado por cromatografía de intercambio aniónico y caracterizado por espectroscopía UV-Vis y HPLC-PDA respectivamente.

Las betaxantinas semisintéticas fueron purificadas secuencialmente por cromatografía liquida en fase reversa C18 y de intercambio aniónico e identificadas mediante UV-vis y tiempo de retención por medio de HPLC-PDA, y espectrometría de masas (HPLC-ESI-MS) evidenciando la presencia de los isómeros R y S debido al carbono quiral (C-6) del ácido betalámico. En total fue posible sintetizar cuatro betaxantinas: Alanina betaxantina (Ala-BX), Leucina-betaxantina (Leu-BX, Fenil-betaxantina (Phe-BX) y Prolina-Betaxantina (Pro-BX), obteniendo rendimientos mayores al 69%. La capacidad antiradical evaluada mediante los métodos TEAC y DPPH, mostró por ambos métodos el siguiente orden de actividad antiradical Ala-BX > Leu-BX > Phe-BX > Pro-BX > AB, siendo Ala-BX 22.74±0.4 veces más antioxidante que el trolox (mmol trolox/ mmol compuesto), en la literatura científica no existen reportes sobre la capacidad antiradical de esta betaxantina.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-56-P ***EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA DE EXTRACTOS METANÓLICOS DE CARLUDOVICA PALMATA***

Evaluación de la Actividad Antimicrobiana de Extractos Metanólicos de *Carludovica palmata*

Paula A Rueda [a], * **William Hidalgo** [a], **Marlon Cáceres** [a]

a. *Grupo de Investigación en Bioquímica y Microbiología, Universidad Industrial de Santander, Colombia*
** Autor de correspondencia: paularuedaruiz27@hotmail.com*

Palabras Claves: Extractos metanólicos; metabolitos secundarios; bacterias patógenas; actividad antibacteriana.

La especie vegetal *Carludovica palmata*, también conocida como la palma de iraca o Jipi-japa, es una planta herbácea perenne de la familia Cyclanthaceae, se distingue por su fibra natural aprovechada en la elaboración de artesanías y construcción de techos.

Previos estudios han revelado que, el potencial antimicrobiano de extractos de especies vegetales como la *Carludovica palmata*, se deben a los metabolitos secundarios presentes en los tejidos vegetales, principalmente como compuestos fenólicos, los cuales poseen una amplia gama de propiedades biológicas de interés y beneficios capaces de enfrentar serios problemas de salud pública, principalmente a causa de microorganismos patógenos resistentes a los antibióticos convencionales.

En esta investigación, se evaluó la actividad antimicrobiana de los extractos metanólicos de la hoja y raíz de la especie vegetal *Carludovica palmata* en tres condiciones fisiológicas, campo, aclimatación e in vitro frente a las bacterias *Escherichia coli*, *Staphylococcus aureus y Pseudomonas aeruginosa*. Además, se determinó los parámetros operativos óptimos para la extracción de los metabolitos secundarios del material vegetal utilizando extracción en fase sólida (SPE). Los resultados muestran que los parámetros más convenientes para la extracción de compuestos fenólicos fueron los siguientes: metanol (grado HPLC), aplicando un tratamiento de ultrasonido (UAE) durante 20 minutos a temperatura ambiente (25°C). El extracto metanólico y la fase acuosa de la raíz en las tres condiciones fisiológicas de las plantas presentaron la mayor actividad biológica con una Concentración Mínima Inhibitoria (CMI) de 5 mg/mL frente a los microorganismos evaluados. El fraccionamiento, purificación y caracterización del compuesto bioactivo está actualmente en progreso. Lo anterior, demuestra el potencial biológico de esta especie vegetal como antimicrobiano contra microorganismos patógenos de interés clínico.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-57-P ***COMPOSICIÓN QUÍMICA, EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA FRENTE HELICOBACTER PYLORI Y CITOTÓXICA DE EXTRACTOS DE SUBPRODUCTOS AGROINDUSTRIALES DE ESPECIES DEL GÉNERO PASSIFLORA***

Composición Química, Evaluación De La Actividad Antibacteriana Frente *Helicobacter pylori* y Citotóxica De Extractos De Subproductos Agroindustriales De Especies Del Género *Passiflora*

Laura C Portela [1,2*], Geison M Costa [1], Alba A Trespalacios[2].

1. Grupo de Investigación de Fitoquímica. Facultad de Ciencias. Pontifica Universidad Javeriana.
2. Grupo de enfermedades infecciosas. Facultad de Ciencias. Pontifica Universidad Javeriana.
Autor de correspondencia: l.portela@javeriana.edu.co

Palabras Claves: *Helicobacter pylori; Passifloras*; composición química; actividad antibacteriana; citotoxicidad.

Helicobacter pylori es una bacteria capaz de colonizar la mucosa gástrica de los humanos produciendo gastritis crónica en todos los infectados y cáncer gástrico en 1-2% de estos (1). Se ha encontrado que la mejor estrategia para reducir la incidencia de cáncer gástrico es la erradicación de la infección por *H. pylori* (2). El tratamiento actual es el uso de diversos antibióticos asociados con un inhibidor de bombas de protones, sin embargo, la eficacia de estas terapias viene disminuyendo especialmente por la resistencia de la bacteria a los antibióticos, por este motivo es de suma importancia encontrar nuevas alternativas terapéuticas (3)(4). Teniendo en cuenta esta problemática, los productos naturales pueden ser una fuente potencial de nuevos agentes antimicrobianos (5). En este orden de ideas, el género *Passiflora* poseen destaque, visto que algunas especies ya han presentado actividad frente a esta bacteria en ensayos previos (6). Por esta razón, este trabajo analizo tanto la composición química como evaluó la actividad antibacteriana y el efecto citotóxico de extractos hidroetanólicos (EtOH 70%) de hojas, semillas y pericarpio de *Passiflora edulis var flavicarpa*, *Passiflora ligularis*, *Passiflora edulis var edulis*, *Passiflora quadrangularis* y *Passiflora alata*. La evaluación de la actividad antibacteriana se realizó con la técnica de dilución en agar, siguiendo las recomendaciones del CLSI, con los extractos evaluados en DMSO 1% (7). El extracto de hojas de *P. edulis var flavicarpa* se mostró como el más activo frente a todas las cepas evaluadas, incluyendo cepas clínicas resistentes, presentando una actividad a una concentración de 250µg/mL. Asimismo, perfiles por HPTLC y UPLC demostró la diversidad en la composición química entre los diferentes órganos evaluados, así como distintos perfiles de flavonoides entre los extractos, con destaque para la composición específica de flavonoides *C*-glucósidos en el extracto más activo (8)(9). Para este, se evaluó también la actividad citotóxica *in vitro* en un modelo de células VERO y AGS, en concentraciones desde 1000µg/mL hasta 62,5µg/mL. La viabilidad se determinó de acuerdo al ensayo del MTT, obteniéndose que el extracto activo de hojas de *P. edulis var flavicarpa* no presenta toxicidad frente a estas células en las concentraciones evaluadas.

REFERENCIAS:

1. Dunn Be, Cohen H, Blaser Mj. Helicobacter pylori. Clin Microbiol Rev. 1997;10(4):720–41.
2. Chey WD, Wong BCY. American College of Gastroenterology guideline on the management of Helicobacter pylori infection. Am J Gastroenterol. 2007;102(8):1808–25

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

3. Dong BN, Graham DY. Helicobacter pylori infection and antibiotic resistance: WHO high priority? Nat Rev Gastroenterol Hepatol. 2017;14(7):383–4.
4. Trespalacios AA, Regino WO, Reyes MM. Resistencia de Helicobacter pylori a metronidazol, claritromicina y amoxicilina en pacientes colombianos. Rev Col Gastroenterol. 2010;25(1):31–8.
5. Vale FF, Oleastro M. Overview of the phytomedicine approaches against Helicobacter pylori. World J Gastroenterol. 2014;20(19):5594– 609
6. Mahady GB, Pendland SL, Stoia A., Hamill FA, Fabricant D., Dietz BM, Chadwick LR. In vitro susceptibility of Helicobacter pylori to botanical extracts used traditionally for the treatment of gastrointestinal disorders. Phytoper. Res., 988 –991 (2005)
7. Clinical and Laboratory Standards Institute. Methods for Antimicrobial Dilution and Disk Susceptibility Testing of Infrequently Isolated or Fastidious Bacteria; Approved Guideline-Second Edition. Second Edi. 2014
8. Costa, Andressa Córneo Gazolaa, Silvana Maria Zucolottoc, Leonardo Castellanos, Freddy Alejandro Ramos, Flávio Henrique Reginattoa, Eloir Paulo Schenkel. Chemical profiles of traditional preparations of four South American Passiflora species by chromatographic and capillary electrophoretic techniques. Revista Brasileira de Farmacognosia 26 (2016) 451–458 15.
9. Urrego, N., Sepúlveda, P., Aragón, M., Ramos, F. A., Costa, G. M., Ospina, L. F., & Castellanos, L. (2021). Flavonoids and saponins from Passiflora edulis f. edulis leaves (purple passion fruit) and its potential anti-inflammatory activity. Journal of Pharmacy and Pharmacology, 73(11), 1530-1538.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-244-P ***COMPARACIÓN DE EXTRACCIÓN UTILIZANDO SOLVENTES EUTÉCTICOS NATURALES EN MORINGA OLEIFERA***

Comparación de Extracción Utilizando Solventes Eutécticos Naturales en *Moringa oleifera*

Lina L. Sandoval [a*], José H. Isaza [a] ,Lizbeth L. López [a].

Grupo de Investigación de Productos Naturales y Alimentos Departamento de Química, Universidad del Valle, Colombia
** Autor de correspondencia: Sandoval.lina@correounivalle.edu.co*

Palabras Claves: *NaDES*; *Moringa oleifera; Metabolitos especializados*; *Antioxidantes; HPLC; CG-MS.*

Los disolventes son ampliamente usados en las industrias y la investigación científica, importantes como medio de reacción y en procesos de purificación. Muchos de ellos presentan riesgos a la salud humana y al medio ambiente, en especial por su volatilidad. Por ello, una de las áreas más importantes de la química verde es la eliminación o reemplazo por disolventes no peligrosos que tengan un impacto ambiental limitado. Por esto se plantea la implementación de los solventes eutécticos naturales profundos (NaDES) en la extracción de metabolitos especializados en la semilla de la *Moringa oleifera*, como una alternativa más ecológica.

Los NaDES son mezclas eutécticas formadas por enlaces no iónicos entre una sal o un aceptor de hidrógeno y un metal o un donador de enlace de hidrógeno; la interacción entre los componentes, da como resultado reducciones en el punto de fusión de los eutécticos resultantes que son significativamente más bajos que sus reactivos iniciales por separado. Estos solventes tienen propiedades fisicoquímicas favorables, como volatilidad insignificante y no toxicidad de los ingredientes constituyentes. Además, al provenir de sustancias producidas por plantas están abundantemente disponibles en la naturaleza, son fácilmente disponibles y renovables.

Se realizaron extracciones bajo diferentes condiciones empleando la extracción asistida por ultrasonido. El proyecto contempla varias etapas, la primera es la variación de la naturaleza del NaDES, su relación molar y la composición masa-agua, con el fin de identificar la mejor condición de la mezcla de solventes a utilizar para obtener una mayor eficiencia de extracción de los metabolitos especializados presentes en la muestra. Luego, se identificará los metabolitos especializados, como los flavonoides, mediante CG-MS y HPLC. Por último, se determinará la actividad antioxidante de la semilla de la *Moringa oleifera* mediante el método FRAP y DPPH, en el cual se espera un resultado positivo, ya que con los cromatrogramas tomados se ha verificado la presencia de flavonoides del tipo kaempferol, correlacionando la capacidad antioxidante de las hojas de la *Moringa oleifera* ampliamente estudiadas con las semillas que no han sido tan investigadas sus propiedades químicas.

Referencias:

1. Doria Serrano, M. d. C. Química verde: un nuevo enfoque para el cuidado del medio ambiente. Edu. quím. 2009, 20 (4), 412 -420. http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0187893X2009000400004&lng=es&tlng=es (accedido el 27/07/2023)
2. Vidal Vides, C. Disolventes eutécticos profundos (des, deep eutectic solvents): Nuevos disolventes biorenovables en catálisis homogénea mediada por metales de transición. Trabajo fin de máster, Universidad de oviedo, Oviedo, 2013. http://hdl.handle.net/10651/18138 (accedido el 27/07/2023)

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-294-P ***REVISIÓN DE CONDICIONES DE EXTRACCIÓN Y CUANTIFICACIÓN DE PSILOCIBINA Y PSILOCINA EN MUESTRAS DE HONGOS ALUCINÓGENOS TRAFICADOS EN BOGOTÁ***

Revisión de Condiciones de Extracción y Cuantificación de Psilocibina y Psilocina en Muestras de Hongos Alucinógenos Traficados en Bogotá

Isabella Monroy [a]*, Julián A. Corredor [a], William. F. Garzón [b], Diego A. Sánchez [c]

[a] *Departamento de Química, Universidad de los Andes, Colombia*
[b] *Grupo de Investigación en Drogas de Abuso, Fiscalía General de la Nación, Colombia*
[c] *Ministerio de Justicia y del Derecho, Colombia*
** Autor de correspondencia: i.monroy@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: Psilocibina; Psilocina; Extracción; Cuantificación; HPLC.

Años después de la primera oleada de consumo y estudio en el campo de los alucinógenos, se ha producido un resurgimiento de su uso recreativo, así como un aumento en las investigaciones que exploran el potencial terapéutico de estas sustancias sobre múltiples trastornos psiquiátricos[1]. Uno de los alucinógenos más conocidos y traficados son los hongos psilocibios o "mágicos", cuyos compuestos activos son la psilocibina y la psilocina. La psilocibina es un alcaloide triptamínico que, al ser consumido en diversas preparaciones, provoca los característicos efectos alucinógenos. Estos se atribuyen a la influencia sobre los receptores serotoninérgicos, lo que ha llevado a estudios prometedores del uso de estas sustancias en condiciones como la depresión, la adicción, entre otras.

Este panorama muestra la necesidad de establecer métodos adecuados para su extracción y cuantificación. Una revisión sistemática de la literatura reveló discrepancias entre los resultados informados por diferentes autores y la falta de consenso sobre las condiciones óptimas para el tratamiento de las muestras y su análisis. Con base en dicha información, en este estudio, se desarrolló un método que permite la extracción de estos analitos[2] de muestras fúngicas traficadas en la ciudad de Bogotá, para su posterior análisis y cuantificación mediante HPLC y GC[3].

Bibliografía

(1) Polo-Castellano, C.; Álvarez, J.; Palma, M.; Barbero, G. F.; Ayuso, J.; Ferreiro-González, M. Optimization through a Box–Behnken Experimental Design of the Microwave-Assisted Extraction of the Psychoactive Compounds in Hallucinogenic Fungi (Psylocibe Cubensis). J. Fungi 2022, 8 (6), 4–15.

(2) Anastos, N.; Lewis, S. W.; Barnett, N. W.; Sims, D. The Determination of Psilocin and Psilocybin in Hallucinogenic Mushrooms by HPLC Utilizing a Dual Reagent Acidic Potassium Permanganate and Tris(2,2′-Bipyridyl)Ruthenium(II) Chemiluminescence Detection System. J. Forensic Sci. 2006, 51 (1).

(3) Rafati, H.; Riahi, H.; Mohammadi, A. Enhancement of Indole Alkaloids Produced by Psilocybe Cubensis (Earle) Singer (Agaricomycetideae) in Controlled Harvesting Light Conditions. Int. J. Med. Mushrooms 2009, 11 (4), 419–426.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-295-P ***ESTUDIO DE IDENTIFICACIÓN QUÍMICA DE MITRAGYNA SPECIOSA "KRATOM" DETECTADO EN UN PRODUCTO COMERCIAL PARA CONSUMO HUMANO EN COLOMBIA***

Estudio de Identificación Química de *Mitragyna Speciosa* "Kratom" Detectado en un Producto Comercial para Consumo Humano en Colombia

Diego A. Sánchez [a]*, William F. Garzón [b], Isabella Monroy [c], Julián A. Corredor [c]

[a] *Ministerio de Justicia y del Derecho, Colombia*
[b] *Grupo de Investigación en Drogas de Abuso, Fiscalía General de la Nación, Colombia*
[c] *Departamento de Química, Universidad de los Andes, Colombia*

diego.sanchez@minjusticia.gov.co

Palabras Claves: kratom; alcaloides; NSP; cromatografía.

Según el último informe de Naciones Unidas, el fenómeno de las Nuevas Sustancias Psicoactivas (NSP), se reportan a junio de 2023, un total de 1212 nuevas drogas. Dentro de la clasificación realizada por la Oficina de las Naciones Unidas contra la Droga y el Delito (UNODC), uno de los grupos corresponde a sustancias basadas en plantas donde se destaca, el Khat, la *Salvia divinorum* y el Kratom. Esta última corresponde a la *Mitragyna speciosa* (de la familia de las Rubiaceae), árbol de gran tamaño que se encuentra en las regiones tropicales y subtropicales del sudeste asiático. De esta planta, en específico de las hojas, se han aislado más de 40 diferentes alcaloides, siendo los más importantes la mitraginina, la mitrafilina y la 7-hidroximitraginina. A dosis bajas se clasifica como una droga estimulante y a dosis altas predominan sus efectos sedantes y narcóticos.

Esta sustancia que se produce en países del sudeste asiático se ha comercializado en varios países de la Unión Europea y de Norte América; sin embargo, el presente año se ha detectado su comercialización en Colombia a través de páginas web, motivo por el cual se desarrolla la presente investigación con el fin de confirmar si el producto promocionado realmente corresponde a *Mitragyna speciosa*, mediante la determinación del alcaloide mitraginina por técnicas cromatográficas con sistema de detección de masas.

La muestra objeto de estudio fue sometida a diferentes métodos de extracción, empleando solventes de diferente polaridad, los extractos fueron analizados por técnicas cromatográficas acoplada a espectrometría de masas como HPLC-MS y GC-MS, de acuerdo a los métodos de análisis forense de muestras incautadas de la Fiscalía General de la Nación, confirmando la presencia del alcaloide mitraginina en el producto comercial.

[1] UNODC, Early Warning Advisory on New Psychoactive substances, Información disponible en: https://www.unodc.org/LSS/SubstanceGroup/Details/4b17fe10-91da-477c-bc3d-593136040668
[2] Veltri, C., & Grundmann, O. (2019). Current perspectives on the impact of Kratom use. Substance abuse and rehabilitation, 23-31.
[3] Tanguay, P. (2011). Kratom in Thailand. Available at SSRN 1908849.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-307-P ***COMPARACIÓN DE CAROTENOIDES PRESENTES EN LA PULPA DE ACCESIONES DE PASSIFLORA EDULIS F. FLAVICARPA POR HPLC-MS Y GC-MS***

Comparación De Carotenoides Presentes En La Pulpa De Accesiones De *Passiflora edulis f. flavicarpa* Por HPLC-MS y GC-MS.

German E Ramirez [a], Esteban Franco [a], Gerson D López [b], Chiara Carazzone [c], Lorena López [d], Kriss D Pantoja [d,e]*

[a] *Grupo de Investigación en Electroquímica y Medio Ambiente, Universidad Santiago de Cali, Cali, Colombia*
[b] *Facultad de Ciencias y Humanidades, Fundación Universidad de América, Bogotá, Colombia*
[c] *Laboratorio de Técnicas Analíticas Avanzadas en Productos Naturales, Departamento de Química, Universidad de Los Andes, Bogotá, Colombia*
[d] *Grupo de Investigación en Productos Naturales y Alimentos, Universidad del Valle, Cali, Colombia*
[e] *Departamento de Ciencias Farmacéuticas y Químicas, Universidad Icesi, Cali, Colombia*
* *Autor de correspondencia: kriss.pantoja@u.icesi.edu.co*

Palabras Claves: *Passiflora edulis f. flavicarpa;* accesión; carotenoides; separación por HPLC y GC; análisis por MS.

La especie *Passiflora edulis f. flavicarpa* se destaca debido a la importancia comercial de sus frutos, los cuales son conocidos por el nombre de "Maracuyá"; la producción mundial de maracuyá estimada es de alrededor de 805.000 toneladas al año, por su alto potencial económico y de distribución; países como Brasil, Ecuador, Perú y Colombia son los principales productores. Actualmente, existen cerca de 6.000 hectáreas cultivadas con una producción de 90.000 toneladas al año, de las cuales el 70% son destinadas a la industria como jugo concentrado para exportación. En Colombia, el cultivo de maracuyá es un gran generador de empleos, con cerca de 240 jornales/hectárea/año y de los cuales el 33% son destinados a la recolección.

La caracterización de la diversidad de la especie con relación al ambiente de cultivo es importante para la obtención de información y clasificación esos entornos donde se cosecha, esto se puede llevar a cabo haciendo una comparación de los compuestos químicos de los frutos en las diferentes accesiones de maracuyá. Esta investigación se enfoca en la comparación de metabolitos secundarios (MS) en la pulpa de los frutos de accesiones de maracuyá, provenientes de distintas regiones de Colombia y adaptadas al suelo de la corporación colombiana de investigación agropecuaria (AGROSAVIA,) para determinar diferencias fitoquímicas en su composición por la influencia de factores agroclimáticos de la zona de procedencia.

Se identificaron MS en los frutos de accesiones de maracuyá, usando cromatografía líquida con detector de arreglo de diodos acoplado a espectrometría de masas en tándem mediante una fuente de ionización química a presión atmosférica (LC-DAD-APCI-MS/MS) y cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS). Se recolectaron los frutos por duplicado en AGROSAVIA (Palmira) y se obtuvieron extractos de diferente polaridad mediante extracción en fase sólida. Los perfiles cromatográficos obtenidos fueron analizados en base a los tiempos de retención promedio y los compuestos presentes en cada una de las muestras. Finalmente, se pudo establecer diferencias contundentes en las concentraciones de (all E)-β-caroteno como carotenoide principal y la abundancia relativa de los demás carotenoides y de los compuestos volátiles en las seis accesiones estudiadas.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-331-P ***ACOPLAMIENTO MOLECULAR DE DOS COMPUESTOS COPRINOL Y RADIANSPENE M DE COPRINELLUS RADIANS CON LA ENZIMA 6JU4***

Acoplamiento Molecular de Dos Compuestos: Coprinol y Radianspene M de *Coprinellus Radians* con la Enzima 6JU4

Stephany Ortega*[1], Oscar M. Mosquera[1], Héctor F. Cortes [2]

1. *Grupo de Investigación de Biotecnología-Productos Naturales, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.*
2. *Grupo de investigación de fotocatálisis y estado sólido, Universidad Tecnológica de Pereira. Colombia.*

**Autor de correspondencia: sortega@utp.edu.co*

Palabras Claves: metabolitos secundarios; *Coprinellus radians;* coprinol, radianspene M; docking molecular

La tirosinasa ha sido ampliamente estudiada debido a que en los últimos años se ha elevado el número de casos de hiperpigmentaciones y se relaciona con el aumento de las radiaciones solares (UV), el uso de las cámaras de bronceo, alteraciones hormonales y enfermedades congénitas. El mecanismo de funcionamiento de esta enzima fue descrito en un estudio publicado en 2020 por Fujieda y colaboradores, donde realizaron mutaciones a la enzima aislada de *Aspergillus orizae* y fue codificada en la Protein Data Bank como 6JU4 una de las formas más activas catalíticamente de la macromolécula. Por lo anteriormente descrito se propone evaluar las interacciones de los compuestos corpinol y radianspene m con la enzima tirosinasa PDB: 6JU4.

Las fermentaciones fúngicas han tenido gran auge en la obtención de los metabolitos secundarios; para el presente estudio se seleccionaron los compuestos coprinol y radianspene m, productos de la fermentación del hongo *Coprinellus Radians*; el cual se encuentra aislado de la *Morus alba* en el laboratorio de biotecnología- productos naturales de la Universidad Tecnológica de Pereira.

El acoplamiento molecular ligando- proteína se ejecutó por tres servidores web SwissDock, Dock-thor y CB- Dock2 y la visualización de los resultados se realizó por el software UCSF Chimera. Versión 1.17.3. Se encontró que la proteína 6JU4 presenta afinidades favorables de tipo enlace de hidrógeno con los siguientes aminoácidos para cada uno de los ligandos: el coprinol: Arg150, Phe151, Asp450, His94, Val359, Gln50, Pro190, Arg195, Gln197, Asp376, Ala436, Leu451, Arg377, Asp24, Asp21, Ile18, Tyr435 y en el caso del radianspene M: Leu451, Arg 455, Phe151, Val359, Gly90, His94, Tyr477, Arg195, Pro190, Asp24, Arg150, Tyr145, Leu451, Ile437, Ala436, Asn262, Leu259, Leu255.

Con base en los resultados preliminares alcanzados se infiere una baja actividad inhibitoria de estos compuestos frente a la enzima debido a que los ligandos se acoplaron alejados de la cavidad catalítica y da paso a continuar abordando investigaciones acerca de posibles moléculas inhibidores de tirosinasa.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-338-P ***SÍNTESIS Y EFECTIVIDAD ANTIRRADICALARIA CONTRA DPPH Y ANTIFÚNGICA CONTRA C.LINDEMUTHIANUM DE (E)-2-(BENZOTIAZOL-2-IL)-3-ARILACRILONITRILOS***

Síntesis Y Efectividad Antirradicalaria contra DPPH y Antifúngica contra *C.lindemuthianum* De (*E*)-2-(Benzotiazol-2-il)-3-arilacrilonitrilos

Diego L. Durango [a*], Jesús H. Gil [a], Simón Á. Henao [a]

[a] *Grupo de Química de los Productos Naturales y los Alimentos, Universidad Nacional de Colombia Sede Medellín, Colombia*

** Autor de correspondencia: dldurango@unal.edu.co*

Palabras Claves: Antracnosis; benzotiazol; acrilonitrilo; condensación de Knoevenagel.

La hibridación molecular surgió como un nuevo concepto en el diseño de nuevos medicamentos y se ha extendido a la obtención de sustancias bioactivas, por ejemplo antimicrobianas o antioxidantes. El núcleo de benzotiazol ha demostrado un amplio espectro de actividades biológicas [1], está presente en medicamentos antiparasitarios como la Ziprasidona y la Tioflavina T; y varios autores han reportado una notable actividad antifúngica de compuestos similares presentes en antifúngicos como Probenazole, entre otros. También se ha señalado que los compuestos que contienen el grupo funcional acrilonitrilo exhiben diversas actividades biológicas; por ejemplo, el Lanoconazole y el Luliconazole son potentes antifúngicos [2]. En el presente trabajo se acoplaron núcleos de 2-benzotiazol acrilonitrilo con benzaldehídos para obtener híbridos mediante reacciones de condensación. Además, se exploró la actividad biológica de algunos de los derivados de benzotiazol obtenidos.

En total se prepararon 15 híbridos a través de la condensación de Knoevenagel. Los compuestos se purificaron y caracterizaron utilizando diferentes técnicas. Adicionalmente, se evaluó la actividad antifúngica contra *C. lindemuthianum* y la actividad inhibitoria del radical DPPH.

Para evaluar la actividad antifúngica se empleó la técnica del agar envenenado [3], cada híbrido a una concentración de 200 µg/ml . Las lecturas del crecimiento micelial se realizaron cada 24 horas durante 4 días. Algunos compuestos exhibieron inhibiciones del hongo *C. lindemuthianum* mayores al 50% (día 1). Sin embargo, se observó un decrecimiento de la actividad antifúngica con el tiempo. Esto sugiere un posible mecanismo de detoxificación del compuesto por parte del microorganismo.

Para la determinación de la actividad antioxidante se empleó el método propuesto por Blois [4]. Se midió el cambio de absorbancia (517 nm) de una solución del DPPH en presencia del híbrido a diferentes concentraciones. Se determinó la concentración del compuesto que inhibió el 50% del radical DPPH. Los híbridos que contienen un grupo fenólico en el fragmento del benzaldehído exhibieron valores IC_{50} del orden de 0,18%.

Se concluye que los derivados (E)-2-(Benzotiazol-2-il)-3-arilacrilonitrilos son candidatos promisorios en el desarrollo de agentes antifúngicos para el control de la antracnosis en frijol. Además, los híbridos que contienen un hidroxilo fenólico en el fragmento de carboxaldehido poseen una actividad antirradicalaria promisoria.

Referencias:

[1]Ali R, Siddiqui N. (2013). Biological Aspects of Emerging Benzothiazoles: A Short Review. Journal of Chemistry.2013.

[2] Uchida K, Nishiyama Y, Yamaguchi H. (2004). In vitro antifungal activity of luliconazole (NND-502), a novel imidazole antifungal agent. Journal of Infection and Chemotherapy. 10: 216-219.

[3] Ali-Shtayeh MS, Abu Ghdeib SI. (1999). Antifungal activity of plant extracts against dermatophytes. Mycoses.42:665-672.

[4] Alam Md. N., Bristi N.J., Rafiquzzaman Md. (2012). Review on in vivo and in vitro methods evaluation of antioxidant activity. Saudi Pharmaceutical Journal; 21:143-152.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-354-P VALIDACIÓN DE UN MÉTODO DE ANÁLISIS DE TERPENOIDES POR HS-GC-MS EN INFLORESCENCIAS DE CANNABIS SATIVA CULTIVADAS EN COLOMBIA

Validación de un Método de Análisis de Terpenoides por HS-GC-MS en Inflorescencias de *Cannabis sativa* Cultivadas en Colombia

Juan S. Mutis-González[a]*, **Chiara Carazzone**[a]

[a] *Laboratory of Advanced Analytical Techniques in Natural Products (LATNAP), Departamento de Química, Universidad de los Andes, Colombia*
* *js.mutis@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: Cannabis sativa; Terpenoides; DoE; Validación; HS-GC-MS

En los últimos años, la planta de *Cannabis sativa* y productos derivados han ganado gran relevancia a nivel social, económico y científico. Por ello, se ha dado una mayor flexibilización en las legislaciones a nivel mundial, de manera que los pacientes y consumidores puedan tener un acceso seguro y regulado a los diferentes productos. Paralelamente, ha emergido la necesidad de crear métodos de análisis validados para el *Cannabis* por parte de laboratorios especializados. Entre estos se destaca el análisis de terpenoides, los cuales son metabolitos secundarios producidos en las glándulas resinosas de las inflorescencias. Estos compuestos son de gran interés debido a que le confieren las propiedades organolépticas a la planta. A su vez, algunos de estos terpenoides exhiben propiedades medicinales y presentan un efecto sinérgico junto con los efectos terapéuticos de los cannabinoides. Por lo tanto, el objetivo de esta investigación fue desarrollar y validar un método de extracción por espacio de cabeza junto con cromatografía de gases acoplado a espectrometría de masas (HS-GC-MS) para el análisis de 34 terpenoides en inflorescencias de *Cannabis* medicinal cultivadas en Colombia. Se llevó a cabo un diseño de experimentos (DoE) para optimizar las condiciones de extracción por espacio de cabeza y se desarrolló un método de monitoreo de iones únicos (SIM) para la cuantificación. Se lograron cuantificar 14 monoterpenos, 14 monoterpenoides, 4 sesquiterpenos y 2 sesquiterpenoides. El α-Pineno, β-Pineno, β-Mirceno, (+)-Limoneno, Linalool y (-)-*trans*-Cariofileno fueron los compuestos mayoritarios presentes en las inflorescencias. El método se caracteriza por una elevada automatización, una preparación de muestra mínima, un análisis corto, bajo consumo de estándares, un amplio intervalo de linealidad, gran selectividad, precisión y exactitud. Por consiguiente, se recomienda el método para un análisis de rutina.

Bibliografía

1. Shapira, A.; Berman, P.; Futoran, K.; Guberman, O.; Meiri, D. Tandem Mass Spectrometric Quantification of 93 Terpenoids in *Cannabis* Using Static Headspace Injections. *Anal. Chem.* **2019**, *91* (17), 11425–11432. https://doi.org/10.1021/acs.analchem.9b02844
2. Krill, C.; Rochfort, S.; Spangenberg, G. A High-Throughput Method for the Comprehensive Analysis of Terpenes and Terpenoids in Medicinal Cannabis Biomass. *Metabolites* **2020**, *10* (7), 276. https://doi.org/10.3390/metabo10070276
3. Polito, J. T.; Lange, B. M. Standard Operating Procedures for the Comprehensive and Reliable Analysis of Cannabis Terpenes. In Methods in Enzymology; Elsevier, 2023; Vol. 680, pp 381–419. https://doi.org/10.1016/bs.mie.2022.07.029

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-355-P ***ESTUDIO DEL EFECTO DE LA TAUTOMERÍA CETOENÓLICA EN LA CUANTIFICACIÓN DE CURCUMINOIDES PRESENTES EN PRODUCTOS NATURALES POR HPLC-DAD***

Estudio del efecto de la tautomería cetoenólica en la cuantificación de curcuminoides presentes en productos naturales por HPLC-DAD.

Isabella Monroy [a*], **Chiara Carazzone** [a]

[a]*Laboratory of Advanced Analytical Techniques in Natural Products, Universidad de los Andes, Colombia*
** Autor de correspondencia: i.monroy@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: Curcuminoides; cuantificación; HPLC-DAD; tautomería cetoenólica.

Los curcuminoides son una pequeña familia de compuestos característicos de la cúrcuma (*Curcuma longa*) a los cuales se les confieren los beneficios de esta raíz. Dentro de las propiedades que se asocian a estos compuestos se encuentran la capacidad antinflamatoria y anticancerígena. Estructuralmente los curcuminoides son muy similares (Figura 1). Es particularmente la estructura de dienona presente en el medio de las tres moléculas la que permite que estas hagan tautomería cetoenólica. Esta tautomería se ha observado al analizar los curcuminoides mediante técnicas cromatográficas como HPLC, en la forma de dos señales distintas correspondientes a un solo compuesto. Lo anterior complica el análisis cuantitativo de muestras complejas que los contengan, pues representa un reto identificar a cuál de los curcuminoides corresponde y definir la proporción que hay entre su forma de enol y de cetona. Se desarrolló un método cromatográfico de HPLC-DAD que permitió la cuantificación de curcuminoides y la diferenciación entre sus tautómeros. Finalmente, este análisis se utilizó para la cuantificación de curcuminoides en muestras de productos naturales que contienen cúrcuma.

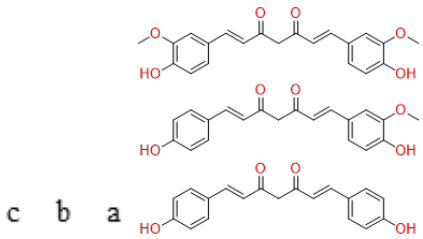


Figura 1: Estructuras moleculares de la curcumina(a), demetoxicurcumina(b) y bisdemetoxicurcumina(c).

Referencias

(1) Wichitnithad, W. Jongaroonngamsang, N. et al. A Simple Isocratic HPLC Method for the Simultaneous Determination of Curcuminoids in Commercial Turmeric Extracts. Phytochemical Analysis 2009, 20 (4), 314–319. https://doi.org/10.1002/pca.1129.
(2) Vidal-Casanella, O. Nuñez, N. et al. Characterization of Turmeric and Curry Samples by Liquid Chromatography with Spectroscopic Detection Based on Polyphenolic and Curcuminoid Contents. Separations 2020, 7 (2). https://doi.org/10.3390/separations7020023.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

(3) Nocito, M. C. De Luca, A. et al. Antitumoral Activities of Curcumin and Recent Advances to ImProve Its Oral Bioavailability. Biomedicines 2021, 9 (10), 1476. https://doi.org/10.3390/biomedicines9101476.
(4) Kawano, S. Inohana, Y. et al. Analysis of Keto-Enol Tautomers of Curcumin by Liquid Chromatography/Mass Spectrometry. Chinese Chemical Letters 2013, 24 (8), 685–687. https://doi.org/10.1016/j.cclet.2013.05.006.
(5) Haq, N. Shakeel, F. et al. Greener Stability-Indicating HPLC Approach for the Determination of Curcumin in In-House Developed Nanoemulsion and Curcuma Longa L. Extract. Separations 2023, 10 (2). https://doi.org/10.3390/separations10020098.
(6) Aggarwal, B. B. Harikumar, K. B. Potential Therapeutic Effects of Curcumin, the Anti-Inflammatory Agent, against Neurodegenerative, Cardiovascular, Pulmonary, Metabolic, Autoimmune and Neoplastic Diseases. The International Journal of Biochemistry & Cell Biology 2009, 41 (1), 40–59. https://doi.org/10.1016/j.biocel.2008.06.010.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-358-P ANÁLISIS ESPECTROSCÓPICO DE LOS EXTRACTOS NATURALES DE LA PLANTA JUSTICIA SECUNDA Y EVALUACIÓN IN SÍLICO DE LOS COMPUESTOS FRENTE A SARS-COV-II

Análisis Espectroscópico de los Extractos Naturales de la planta *Justicia secunda* y Evaluación in Sílico de los Compuestos Frente a SARS-CoV-II

Adhalía G. Martínez [a], Alicia V. Nestoso[b], Belky T. Palencia[c]*, Julián Patiño[d], Miguel A. Rosas[e]

[a] *Tecnológico de Estudios Superiores de San Felipe del Progreso, México*
[b] *Universidad del Valle – Sede Yumbo, Colombia*
[c] *Instituto Tecnológico de Matamoros, México*
[d] *Universidad del Valle – Sede Yumbo, Colombia*
[e] *Universidad Autónoma de Guerrero, México*

**Autor de correspondencia: belky.palencia@correounivalle.edu.co*

Palabras Claves: Análisis espectroscópico; Acoplamiento molecular; COVID-19; *Justicia secunda*.

En la actualidad no se dispone de fármacos que sean agentes terapéuticos efectivos contra el coronavirus tipo 2 del síndrome respiratorio agudo grave (SARS-CoV-II) (COVID-19), colocando a la población actual en una posición muy vulnerable. Tradicionalmente, el desarrollo de nuevos fármacos requiere varias etapas y un tiempo extenso; sin embargo, el uso de herramientas computacionales ha permitido encontrar estructuras moleculares que, luego de un proceso de optimización se han convertido en fármaco viables, por lo cual el diseño de fármacos *in sílico* (DIFAC) se convierte en una estrategia óptima para evaluar interacciones con las proteínas del virus. Desde tiempos remotos, se han utilizado diferentes agentes terapéuticos de origen vegetal debido a la riqueza y efecto de metabolitos secundarios entre el sustrato, el receptor; y el COVID 19, no es la excepción en esta materia. La planta *Justicia secunda* se conoce por su conocimiento ancestral y el saber popular como tratamiento para la diabetes, tanto así que su nombre común es denominado insulina y resulta una planta promisoria para realizar análisis *in sílico*.

Dado lo anterior, se emplearon 120 g de hojas secas de *J. secunda*, procedentes del jardín de la Universidad del Valle Sede Yumbo y se obtuvo por percolación los extractos con etanol (EtOH) y ciclohexano (Cy). El análisis espectroscópico de las fracciones mayoritarias de cada extracto se llevó a cabo mediante espectroscopia Infrarroja (FTIR) y también, los extractos fueron sometidos a cromatografía de gases acoplada a masas (CG-MS). En los análisis espectroscópicos de los 2 extractos y fracciones, para *J. secunda* se indica la presencia de terpenos, ácidos grasos, ésteres, alcoholes, compuestos carbonílicos y nitrogenados. Los compuestos sugeridos por la base de datos del equipo CG-MS se evaluaron *in sílico* frente a tres proteínas: espiga (variante 01C), espiga (variante británica) y la proteasa principal (PDB: 6YNQ) del SARS-CoV-II (COVID-19) usando el servidor SwissDock.

Dos de los compuestos obtenidos (licopeno y betacaroteno) muestran los valores más negativos de acoplamiento molecular (mayor afinidad) y se obtuvo resultados prometedores del análisis *in sílico*, para el licopeno y la variante 01C de la proteína espiga del SARS-CoV-II (COVID-19).

Referencias:

Rolim, C. E. L.., Quaresma, A. C. S. Q., Chagas, C. K. S.., Carréra Silva Júnior, J. O.., Melo, P. R. de S., & Dolabela, M. F. (2022). Pharmacognostic Study, Phytochemical and Toxicity Assessment of Justicia secunda vahl. Research, Society and Development, 11(12), e240111234344. https://doi.org/10.33448/rsd-v11i12.34344

Perfil metabólico y espectros IR de plantas de *Croton Gosypifollius* obtenidas en invernadero

Carlos Coy-Barrera[a] **Vicky Carolina Gonzalez**[a]

[a]Departamento de Química, Universidad Militar Nueva Granada
*Autor correspondencia: carlos.coy@unimilitar.edu.co

Palabras Clave: *Croton*, Flavonoides, Euphorbiaceae, perfil metabólico

El género Croton (Euphorbiaceae), del cual se reporta un amplio rango de aplicaciones en la medicina tradicional, ha sido objeto de estudio en los últimos años teniendo en cuenta la gran diversidad de compuestos químicos que biosintetiza, se destaca principalmente la presencia de diterpenos de tipo labdano, ciclitoles, triterpenos, esteroides, sustancias fenólicas y flavonoides, los cuales, se caracterizan porque poseen un amplio rango de actividades biológicas [1]. La variedad química que presenta este género ofrece un arsenal de compuestos con potencial uso farmacológico, lo que justifica la importancia de su estudio en cuanto a temas de Bioprospección y utilización alternativa [2]. De acuerdo con lo anterior, la presente investigación exploró la introducción en cultivo en invernadero de muestras de la especie *Croton Gosypifollius*, la cual se encuentra ampliamente distribuida en la región cundiboyacense y no reporta estudios previos. Se seleccionaron inicialmente semillas maduras silvestres y certificadas, para el cultivo en invernadero se realizó la siembra en una mezcla de tierra y cascarilla y para la siembra *in vitro* se realizó una desinfección de las muestras por triplicado, con etanol por 1 minuto e hipoclorito de sodio al 3 % por 15 min. Luego se realizó la extracción de los embriones y se sembraron en medio MS solidificado con Gellum Gum y se incubaron a 22°C en condiciones de luz. Al cabo de 7 días se observó la germinación de los embriones, los cuales se subcultivaron a medio MS solidificado con agar, las plántulas fueron endurecidas en invernadero y cuando se desarrollaron se tomaron muestras de raíz, tallo y hojas con el fín de realizar el correspondiente perfilamiento por HPLC utilizando un método previamente estandarizado. Finalmente utilizando espectros FTIR y HPLC-MS y teniendo en cuenta reportes bibliográficos se logró la identificación de grupos funcionales y la identificación de algunos flavonoides tipo flavona como la isoramnetina, quercetina y 5-hidroxi- 7-metoxiflavona en los extractos de las muestras de invernadero. Estos resultados permiten la exploración inicial y el comportamiento del metaboloma de una especie a lo largo de su desarrollo teniendo en cuenta condiciones ambientales de crecimiento con el fin de encontrar alternativas de uso en varios campos. Agradecemos a la vicerrectoría de Investigaciones de la UMNG por la financiación del proyecto CIAS3746.

[1] Figueiredo, F. W., Rodriguez, M., Cantaño, L., Santana, M., Costa dos Santos, I. R., Coelho, N., Gomes-Leal, W., Aguiar, E. H., Costa, G., and Nunes, R (2020). Chemical composition, antioxidant activity, anti-inflammatory and neuroprotective effect of Croton matourensis Aubl. Leaves extracts obtained by supercritical CO_2. The journal of Supercrital Fluids, Volume (165). https://doi.org/10.1016/j.supflu.2020.104992

[2] Oliani, J., Ferreira, M. J. P., Salatino, A., & Salatino, M. L. F. (2021). Leaf flavonoids from croton urucurana and C. floribundus (euphorbiaceae). Biochemical Systematics and Ecology, 94, 104217. doi:10.1016/j.bse.2020.104217

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-408-P ***ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA DE ACEITES ESENCIALES FRENTE A FITOPATÓGENOS PREVALENTES EN AGRICULTURA.***

Actividad antimicrobiana de aceites esenciales frente a fitopatógenos prevalentes en agricultura.

Paola Borrego-Muñoz[a]*, Liliana A. Naranjo-Amaya[a], Luis M. Pombo[a], Camilo Mahecha-Mahecha[a].

[a] *Grupo de Investigación en Farmacología Vegetal y Terapéuticas Alternativas - GIFVTA, Escuela de Medicina, Fundación Universitaria Juan N. Corpas, Bogotá, Colombia.*

* *Autor de correspondencia: paola.borrego@juanncorpas.edu.co*

Palabras Claves: Antibacterianos; Antifúngicos; Fitopatógenos; Aceites esenciales; Inocuidad alimentaria.

La inocuidad alimentaria es relevante para la salud pública, al garantizar la seguridad de los alimentos que consumimos y promover la seguridad alimentaria global. La contaminación de los alimentos con microorganismos patógenos, puede tener un impacto negativo en la salud causando enfermedades transmitidas por alimentos y así mismo, repercute en la pérdida de cosechas. Por lo cual es relevante proponer nuevas alternativas para su control, que vayan acorde con los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS), como el ODS-2 (Hambre Cero) y el ODS-3 (Salud y Bienestar). Una posible alternativa para el control de fitopatógenos en la agricultura, es el uso de aceites esenciales (AE) ya que son candidatos prometedores por ser seguros, bioactivos y biodegradables.

El objetivo del presente proyecto fue evaluar la actividad antimicrobiana de 10 AE a nivel *in vitro*. Esta evaluación se realizó por dos metodologías, para las bacterias *Agrobacterium tumefaciens* y *Pectobacterium carotovorum* por el método Kirby-Bauer y para los hongos *Fusarium oxysporum* y *Botrytis cinerea* el ensayo en medio modificado a microescala. Se calcularon los halos de inhibición para determinar los valores de IC_{50} por medio de una regresión no lineal. La composición química de los AE evaluados se realizó por CG-EM. Los AE que presenten mejor actividad antimicrobiana, posteriormente se evaluarán en mezcla, con el fin de potenciar su actividad.

Hasta el momento se ha evaluado la actividad antibacteriana y como resultado sobre *P. carotovorum* los AE de Orégano (*Origanum vulgare*), Naranja (*Citrus sinensis*) y Albahaca (*Ocimum basilicum*) mostraron porcentajes de inhibición entre el 60-89% y valores de IC_{50} entre 140 y 200 mg/mL. Para *A. tumefaciens* los AE de Orégano (*O. vulgare*), Naranja (*C. sinensis*), Pronto alivio (*Lippia alba*) y Albahaca (*Ocimum basilicum*) presentaron porcentajes de inhibición entre el 60 y el 95% y valores de IC_{50} cercanos a 250 mg/mL. La evaluación de los AE sobre los hongos fitopatógenos se encuentra en proceso. De los AE que presentaron los mejores porcentajes de inhibición contra las bacterias evaluadas, se identificaron, compuestos del tipo monoterpeno como: p-Cimeno, β-Mirceno y Linalol, del tipo sesquiterpeno: γ-Cadineno, Germacreno D y δ-Guaijeno, entre otros, por CG-EM.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-435-P ***IDENTIFICACIÓN DE COMPUESTOS ORGÁNICOS VOLÁTILES DE FRUTALES AMAZÓNICOS (CANANGUCHA, CAMU-CAMU Y UVA CAIMARONA) MEDIANTE SPME-HS-GC-MS***

Identificación de Compuestos Orgánicos Volátiles de Frutales Amazónicos (Cananguchа, Camu-Camu y Uva Caimarona) Mediante SPME-HS-GC-MS

Juan D. Ramirez Castro[a,b], **Gerson-Dirceu López**[c], **Chiara Carazzone**[b], **Paula Galeano** [a,*]

[a] *Grupo de Investigación en Productos Naturales Amazónicos (GIPRONAZ), Universidad de la Amazonia, Colombia.*
[b] *Laboratory of Advanced Analytical Techniques in Natural Products (LATNAP), Universidad de los Andes, Colombia.*
[c] *PhysCheMath Research Group, Universidad de América, Colombia.*
***** *Autor de correspondencia: p.galeano@udla.edu.co.*

Palabras Claves: compuestos orgánicos volátiles; frutas amazónicas; aroma; SPME-HS; GC-MS.

Los compuestos orgánicos volátiles (VOCs) determinan algunas características de las frutas, como el olor y el sabor; además, algunos de estos compuestos son responsables de sus propiedades bioactivas (antioxidante, anticancerígena y antimicrobiana). Por ello, esta investigación se enfoca en la identificación de los VOCs de frutas amazónicas como: *Myrciaria dubia* (Camu-camu); *Pourouma cecropiifolia* (Uva caimarona) y *Mauritia flexuosa* (Cananguchа), mediante la técnica de microextracción en fase solida con espacio de cabeza (SPME-HS). Se realizó la extracción de los VOCs en las tres frutas amazónicas empleando una fibra DVB/CWR/PDMS (divinilbenceno/carbowax/polidimetilsiloxano) de 80µm x 10mm, y la separación e identificación de los metabolitos se realizó mediante cromatografía de gases acoplado a espectrometría de masas (GC-MS). Inicialmente se optimizaron las condiciones de preparación de la muestra, así como la separación cromatográfica para la determinación de los VOCs. Se lograron identificar compuestos volátiles clasificados en ésteres de ácidos grasos, éteres, aldehídos, cetonas, alcoholes, alcanos, alquenos, así como monoterpenos y sesquiterpenos. Para el Camu-camu se identificaron 80 VOCs, de los cuales α-pineno, D-limoneno y cariofileno son los más abundantes y a los que se atribuye el aroma amaderado, cítrico y dulce de la fruta; mientras que para la Uva caimarona fueron 30 VOCs, siendo el acetato de etilo, hexanal, linalool y salicilato de metilo los compuestos mayoritarios, y a su vez los responsables del aroma afrutado y floral. En Cananguchа se observaron un total de 28 VOCs, de los cuales hexanal, 1-penten-3-ona, 2,3-butanodiol y 2,4-heptadienal fueron los compuestos mayoritarios, y a su vez los responsables del aroma graso, dulce, afrutado y fresco. Los resultados permiten visibilizar el potencial de las frutas amazónicas e incentivar su aprovechamiento mediante un criterio de selección como es el parámetro organoléptico.

Bibliografía

Avila-Sosa, R., Montero-Rodríguez, A. F., Aguilar-Alonso, P., Vera-López, O., Lazcano-Hernández, M., Morales-Medina, J. C., & Navarro-Cruz, A. R. (2019). Antioxidant Properties of Amazonian Fruits: A Mini Review of in Vivo and in Vitro Studies. *Oxidative Medicine and Cellular Longevity*, *2019*. https://doi.org/10.1155/2019/8204129

Conceição, N., Albuquerque, B. R., Pereira, C., Corrêa, R. C. G., Lopes, C. B., Calhelha, R. C., Alves, M. J., Barros, L., & Ferreira, I. C. F. R. (2020). By-products of camu-camu [Myrciaria dubia (Kunth) McVaugh] as promising sources of bioactive high added-value food ingredients: Functionalization of yogurts. *Molecules*, *25*(1), 1–17. https://doi.org/10.3390/molecules25010070

de Souza Carvalho, L. M., Lemos, M. C. M., Sanches, E. A., da Silva, L. S., de Araújo Bezerra, J., Aguiar, J. P. L., das Chagas do Amaral Souza, F., Alves Filho, E. G., & Campelo, P. H. (2020). Improvement of the bioaccessibility of bioactive compounds from Amazon fruits treated using high energy ultrasound. Ultrasonics Sonochemistry, 67(April), 105148. https://doi.org/10.1016/j.ultsonch.2020.105148

Souza, F. D. C. D. A., Silva, E. P., & Aguiar, J. P. L. (2021). Vitamin characterization and volatile composition of camu-camu (Myrciaria dubia (HBK) McVaugh, Myrtaceae) at different maturation stages. *Food Science and Technology (Brazil)*, *41*(4), 961–966. https://doi.org/10.1590/fst.27120

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-436-P ***METABOLITOS ESPECIALIZADOS DE MERIANIA TOMENTOSA, M. LONGIFOLIA, M. MACROPHILA, M. QUINTUPLINERVIS EN EXTRACTO EN CH2CL2 MEDIANTE GC-MS***

Metabolitos especializados de *Meriania tomentosa, M. longifolia, M. macrophila, M. quintuplinervis* en extracto en CH_2Cl_2 mediante *GC-MS*

Cesar A. Galicia Virviescas [a]*, Lizbeth L. López Parra [a], José H. Isaza Martínez [a],

[a] *Grupo de Investigación en Productos Naturales y Alimentos (GIPNA), Universidad de Valle, Colombia*
** Autor de correspondencia: cesar.galicia@correounivalle.edu.co*

Palabras Claves: Melastomataceae; *Meriania*; terpenoides; GC-MS; Kovats Index.

La familia de las Melastomatáceas, presentan diversas especies con estudios sobre sus metabolitos y la aplicación que tienen éstos en diferentes campos (farmacéutico, alimenticio, agroquímico). La mayoría de las especies de *Meriania*, se hallan en la zona norte Andina, principalmente en Colombia, con más de 30 especies. Para este estudio, se colectaron muestras en tres puntos: *M. tomentosa* (reserva el refugio en Dagua-Valle del Cauca), *M. longifolia* y *M. macrophila* (figura 1) bosque de Galilea Villarica- Tolima y *M. quintuplinervis* (reserva La Patasola en Salento-Quindío), identificadas por el profesor A. Zuluaga, Herbario Luis Sigifredo Espinal Tascón de la Universidad del Valle. Se toman 10 g (de cada especie) de hojas secas y trituradas, para extracción por ultrasonido con 150 mL de CH_2Cl_2 durante 15 min (3x). Los extractos se concentraron (10 veces) hasta 45 mL, mediante rota evaporación, para ser analizadas en un cromatógrafo de gases acoplado a espectrómetro de masas (Shimadzu GCMS QP2010 Ultra) en una columna Rxi-1HT (30 m x 0.25 mm ID x 0.25 □m Film) con gradiente lineal de temperatura (40 ºC hasta 360 ºC) a 10 ºC/min. La identificación se realizó por comparación de los espectros de masas a 70 eV y los índices de retención de Kovats referenciados con los *n*-alcanos (*n*C10 – *n*C39), con los reportados en las bibliotecas NIST y Wiley, así como NIST Chemistry WebBook, al igual que, en bases en la web como: SDBS, lipids maps, hmbd.

De esta manera, se identificaron 38 metabolitos, *n*-alcanos *n*C27 -*n*C30, hexacoseno, tres fitadienos isómeros, octacosanol, triacontanol, fitol, triacontanal, ácidos palmítico, oleico y □-linolénico, □-tocoferol, □-tocoferolquinona, □-tocoferol, 3,5-estigmastadieno, 4-estigmasten-3-ona, campesterol, □-sitosterol, fucosterol, □-sitosterol, escualeno, □-amirina, uvaol, lupeol, lupenona (Figura 1).

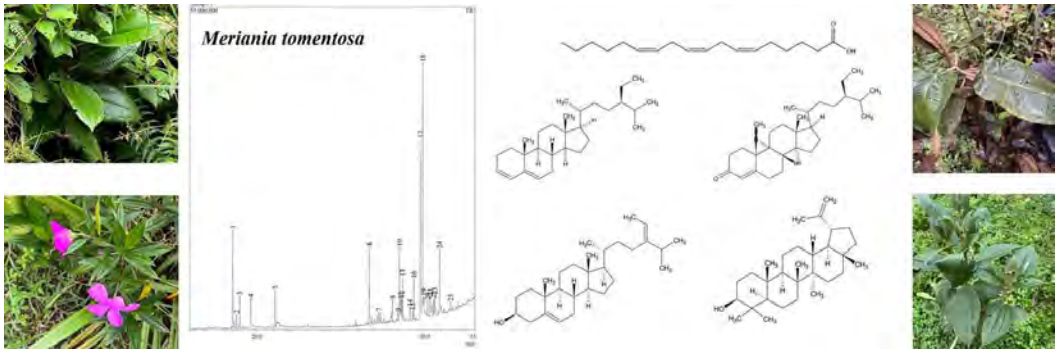


Figura 1. CGMS *Meriania tomentosa* y metabolitos identificados

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IX-439-P USO DE EXTRACTOS ETANÓLICOS DE CROTON Y SU POTENCIAL USO COMO INHIBIDORES DE CORROSIÓN EN ACERO AL CARBÓN EN MEDIO ÁCIDO

Uso de extractos etanólicos de *Croton* y su potencial uso como inhibidores de corrosión en acero al carbón en medio ácido

Carlos Coy-Barrera, Sergio Alejandro Torres[a], Vicky Carolina Gonzalez[a], Lili Dahiana Becerra[a]

[a]Departamento de Química, Universidad Militar Nueva Granada
*Autor correspondencia: carlos.coy@unimilitar.edu.co

Palabras Clave: *Croton*, Euphorbiaceae, Acero al carbón, corrosión

Los problemas de corrosión son frecuentes en la industria química, petrolera, naval, de construcción civil, en los medios de transporte, los sistemas de comunicación, entre otros. Los inhibidores de corrosión son ampliamente utilizados en el control y prevención de este fenómeno; la mayoría de los compuestos usados para este fin resultan ser en muchos casos demasiado tóxicos, costosos y peligrosos para el medio ambiente y el ser humano. Estos inhibidores orgánicos sintéticos son los más empleados y por lo tanto, las nuevas legislaciones ambientales, como la Ley de Control de Sustancias Tóxicas de la Environmental Protection Agency (EPA) de los Estados Unidos y la Directiva de Restricción de Sustancias Peligrosas de la Unión Europea, promueven el desarrollo de inhibidores de corrosión ambientalmente amigables, que no contengan metales pesados como cromo y plomo o compuestos orgánicos sintéticos. Como alternativa, el uso de extractos de plantas resulta ser una fuente renovable de compuestos químicos que poseen un alto potencial como inhibidores ya que la mayoría son biodegradables, abundantes en la naturaleza y no son tóxicos. Hasta el momento, ya se ha reportado la aplicación de extractos obtenidos a partir de semillas, frutas, hojas, flores, etc. [1-2] y se ha encontrado que reducen notablemente la velocidad de corrosión. En los extractos de plantas, están presentes un gran número de compuestos químicos, particularmente con núcleos heterocíclicos, antocianinas, acridonas, entre otros; que inhiben la corrosión de manera eficiente dada su actividad antioxidante y su capacidad de polarizar las superficies de materiales metálicos, tolerando una considerable ventana de óxido-reducción [3]. En esta investigación se presenta el uso de extractos etanólicos de especies de *Croton* (*C. Bogotanus*, *C. Gosypifoliu*s~~m~~, *C. Funckianus* y *C. purdiei*) y la evaluación de su potencial como inhibidor de corrosión sobre el modelo de acero al carbón, utilizando técnicas como polarización potenciodinámica y espectroscopia de impedancia electroquímica. Se presentan los valores de % de inhibición de la corrosión para los extractos testeados, que resultaron tener valores entre 50% y 80%, resultados apoyados con el uso de SEM. Agradecimientos a la vicerrectoría de investigaciones de la UMNG por el apoyo del proyecto CIAS3746.

Referencias:

1. Raja, P., Sethuraman, M. (2008). Natural products as corrosion inhibitors for metals in corrosive media. Mater Lett., 62: 113 –11.
2. Abdullah, D. (2011). A review: plant extracts and oils as corrosion inhibitors in aggressive media. Industrial Lubrication and Tribology, 63 (4) 227–233
3. Benítez LPT, Castellar PJM, Percy EDA, Bravo MJB. Uso de extractos de plantas como inhibidores de corrosión. Inf. tec. 2014;78(2):155-64.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA AMBIENTAL

XIII-62-P ESTUDIO FISICOQUÍMICO DE LA DEGRADACIÓN DE LA CONCHA DE PAPA (PERIDERMIS DEL SOLANUM TUBEROSUM) POR MEDIO DE UNA AUTOCLAVE ANAEROBIA A ESCALA DE LABORATORIO

Estudio Fisicoquímico de la degradación de la Concha de Papa (*Peridermis del Solanum Tuberosum*) por medio de una Autoclave Anaerobia a Escala de Laboratorio

Maryoli L. Mendoza[a]; Diego F. Montaño [a]; José H. Quintana Mendoza [b]*

[a] *Centro de Investigación CEDIMat, Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de Pamplona Km 1 Vía Bucaramanga, Colombia*
[b] *Centro de Investigación Biocalorimetria, semillero sebioca, Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de Pamplona Km 1Via Bucaramanga, Colombia*
** Autor de correspondencia: jhquintanam@gmail.com*

Palabras Claves: Degradación anaerobia; cáscara de papa; Fertilizantes Líquidos; Abono orgánico; Propiedades fisicoquímicas.

El proyecto enfoca sus esfuerzos en el entendimiento y comprensión de la degradación de residuos sólidos orgánicos bajo condiciones controladas. Buscando aportar soluciones frente a las toneladas de residuos que se generan en la ciudad de Pamplona Norte de Santander, mediante la implementación de una autoclave a escala de laboratorio, bajo condiciones anaeróbicas, con cáscara de papa y control de parámetros ambientales; permitiéndonos generar un prototipo de estudio para la caracterización de lixiviado, material sólido y gases emanados durante el proceso de degradación.

La caracterización de las diferentes fases del sistema en estudio en este trabajo se realizó mediante la utilización de técnicas espectroscópicas como ATR-FTIR y UV-VIS, fisicoquímicas (pH, ceniza, humedad, alcalinidad, DBQO, nitrito, nitratos, fosfatos y turbidez) y Cromatografía de gases para los componentes volátiles. Dicho estudio de degradación de la cáscara de papa sugiere que este residuo sólido es prometedor para el aprovechamiento y la posible implementación de abonos orgánicos y fertilizantes líquidos para el crecimiento de diferentes plantas y cultivos de mayor exigencia de nutrientes como el rábano, sobre el cual se realizaron pruebas de abono con resultados interesantes, con lo que se pretende aportar nuevas propuestas de aprovechamiento de los diferentes residuos orgánicos

Remoción de Antibióticos Comerciales por Composites Obtenidos a Partir de Residuos de poliestireno y bentonita

Daira J Pinzón Valencia [a], **José H Quintana Mendoza** [a]*, **Diana A Torres Sánchez** [a]

[a] *Centro de Investigación Biocalorimetria, Semillero SeBioca, Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de Pamplona Km 1Via Bucaramanga, Colombia*
** Autor de correspondencia: jhquintanam@gmail.com*

Palabras Claves: Composite; poliestireno; bentonita; limoneno; remoción.

La generación de residuos es una problemática mundial que ha venido en crecimiento, debido al incremento de la población y el aumento de los procesos de manufactura como el empacado, el cual una vez el producto es consumido se desecha. Dentro de la gran diversidad de residuos, se generan compuestos orgánicos derivados de la agricultura como las cáscaras de naranja y los plásticos de primer uso como el poliestireno.
Con el objetivo de reutilizar dichos residuos y dar un valor agregado a materiales naturales como las arcillas, en el presente estudio se desarrolló un material compuesto poliestireno reciclado-arcilla bentonita-aceite esencial de naranja; dicho material se caracterizó mediante ATR-FTIR, TGA/DSC, DRX, SEM, GC y UV-Vis. Lo anterior permitió la obtención de un material compuesto al cual se le evaluó la capacidad de remoción de compuestos contaminantes de bajo peso molecular en diferentes matrices, específicamente antibióticos como Ciprofloxacina, Azitromicina, Trimetoprima y Doxiciclina, logrando una remoción del 75% del antibiótico, lo que muestra la purificación del agua; con lo que se espera obtener un valor agregado al material compuesto obtenido en aplicaciones por ejemplo de industria farmacéutica, cosmética y alimentaria.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-64-P ***GASES ENDÓGENOS DEL TERRITORIO COLOMBIANO Y CLIMA TERRESTRE: COMPARATIVO DE FLUJOS ANUALES***

Gases Endógenos del Territorio Colombiano y su Efecto en el Clima Terrestre: Comparativo de Flujos Anuales

Gustavo Garzón[a,b*], **Fhilly Abueta**[a], **Luisa F Meza**[a,b]

[a] *Servicio Geológico Colombiano SGC, Dirección Técnica de Laboratorios, Cali, Colombia*
[b] *Centro de Aplicaciones Fisicoquímicas en el Entorno, Grupo de Investigación FISQUIM, Cali, Valle*
** Autor de correspondencia: ggarzon@sgc.gov.co*

Palabras Claves: Gases; Clima; GEI; Tierra; Atmósfera.

Se presentan resultados promediados de los gases que se generan en el interior de nuestro planeta Tierra y que fluyen a través de zonas fracturadas de la corteza terrestre tipo chimeneas volcánicas, fallas activas, cuevas, cavernas, minas activas, minas abandonadas. Se discute información de las bases de datos de nuestro grupo de investigación FISQUIM de una ventana cercana a los últimos 30 años. Se realizó un estudio de antecedentes bibliográficos, tomando en consideración los mas avanzados conocimientos que se tienen sobre el clima externo a nuestro planeta, generado por los rayos cósmicos y nuestra estrella mas cercana, conocidos como factores exógenos; y, los principales cuatro factores que definen el clima para la región andina colombiana: 1. Irradiancia solar; 2. Gases de efecto Invernadero GEI antropogénicos; 3. Gases endógenos del territorio colombiano (volcánicos, fallas activas, sistemas espeleológicos); y, 4. Gradientes térmicos de la atmósfera suramericana, conocido como ENOS El Niño Oscilación del Sur.

Los resultados que se comparten en el XIX_CCQ permiten observar, a diferencia de lo publicado por algunos colegas climatólogos, que los factores climáticos 1 y 3 no son constantes, y para esto, con base en las bases de datos y las publicaciones internas de los flujos gaseosos de los volcanes Nevado del Ruiz, Galeras, Puracé y Nevado del Huila, se demuestra que no han permanecido constantes en las últimas décadas, dado que muestran variaciones en forma de ciclos que definen su actividad superficial. Se concluye que los cuatro factores climáticos son variables en el tiempo y que cada uno tiene períodos de mayor efecto sobre el clima planetario. Se explican también las diferencias de huella de carbono de los países desarrollados, en comparación con los países que como Colombia no muestran huella de carbono relativamente significativa (Figura 1).

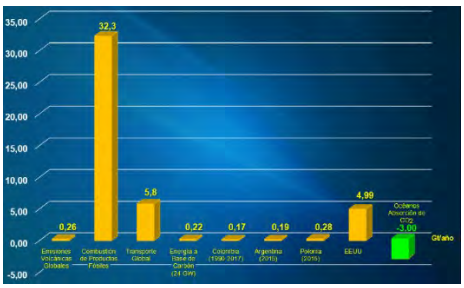


Figura 1. Comparativo de CO_2 emitido a la atmósfera terrestre [Gt/a].

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-66-P ***REMOCIÓN DE CD2+ PRESENTE EN AGUA MEDIANTE EL USO DE BIOADORBENTES SINTETIZADOS A PARTIR DE CASCARILLA DE ARROZ Y DELFTIA LACUSTRIS***

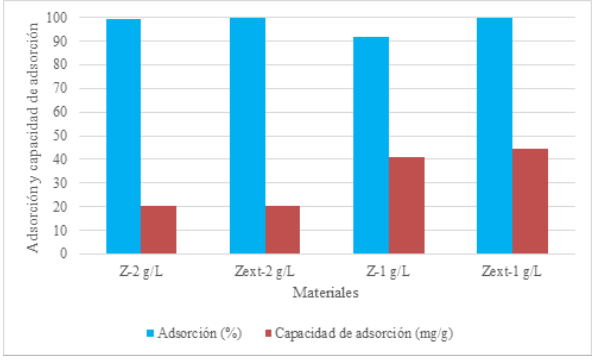
Remoción de Cd^{2+} Presente en Agua Mediante el Uso de Bioadorbentes Sintetizados a Partir de Cascarilla de Arroz y *Delftia lacustris*

Maria P Lozano [*a], **Ximena C Pulido** [a], **Cesar A Jaramillo** [a], **Maryeimy Varón**[b].

[a] *Grupo de investigación en Química aplicada a Procesos Ecológicos, Universidad del Tolima, Colombia*
[b]*Genética y Biotecnología Vegetal de la Universidad del Tolima, Universidad del Tolima*
* *Maria Paola Lozano Patiño: mplozanopa@ut.edu.co*

Palabras Claves: zeolita; cascarilla de arroz; adsorción; cadmio

El desarrollo industrial y los patrones de consumo actuales han incrementado la generación de residuos de metales pesados como el cadmio, que al ingresar a la cadena trófica compromete el equilibrio de los ecosistemas y las comunidades debido a su fuerte afinidad por el azufre y grupos sulfhidrilo presentes en diferentes enzimas generando afectaciones en el sistema nervioso central (SNC), sistema inmune, y posible daño en el ADN. El objetivo de este trabajo fue sintetizar un material a partir de cascarilla de arroz capaz de adsorber Cd^{2+} presente en agua. La síntesis hidrotermal se llevó a cabo a una temperatura de 90 °C por 12 h, con una relación 1:1 SiO_2/Al_2O_3 y CTAB como agente plantilla para la generación de la mesoporosidad. Para aumentar su capacidad de adsorción, el material se conjugó extracto proteico de *Delftia lacustris*. Se evaluó la capacidad de adsorción de Cd^{2+} a una concentración de 50 ppm, la caracterización de los materiales se hizo por Espectroscopía Infrarroja por Transformada de Fourier (FT-IR) y difracción de rayos X (XRD). El material adsorbente y los conjugados mostraron remoción por encima del 90% y capacidades de adsorción superiores a 40 mg/g empleando 1 g/l de material. (Figura 1)



Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Reducción De Contaminantes En Aguas Por Medio De Radiación UV Artificial Implementando Fotocatálisis (Fase 3)

William E. Albornoz[a]*, Miguel A. Delgado Gómez[b], Nelson L. Forero Chacón[a].

[a] *Física del Medio ambiente y Energía Solar, Universidad distrital Francisco José de Caldas, Bogotá D.C, Colombia*
[b] *PHYSIKALISCH, Universidad distrital Francisco José de Caldas, Bogotá D.C, Colombia*
** Autor de correspondencia: weduardoa@udistrital.edu.co*

Palabras Claves: Reducción; Fotocatálisis; Contaminantes; Fosfatos; Dureza Total;

Resumen
En este proyecto se busca establecer la influencia que tiene la luz UV artificial en los procesos de degradación fotocatalítica mediada por Dióxido de Titanio (TiO2) como fotocatalizador el cual ha presentado a nivel industrial, una versatilidad y una alta capacidad de degradación de contaminantes orgánicos e inorgánicos, siendo esta una técnica clave para este proyecto y de esta manera tratar de ayudar con la problemática que sufren algunos países en vía de desarrollo, el cual es la escasez de agua potable Objetivo de desarrollo sostenible N°6 de la ONU.

El trabajo se dividió en tres fases, la primera en la corroboración y reducción de contaminantes Inorgánicos (Turbidez), la segunda en la reducción de contaminantes Orgánicos (Nitratos y Sulfatos), la tercera y última fase en la reducción de contaminantes Orgánicos e Inorgánicos (Fosfatos y Dureza Total), esta última es el centro focal de este informe.

Para la validación y corroboración de los métodos de análisis utilizados, se rigen dentro de las normativas internacionales, establecidas por la EPA de EE.UU, de contaminantes del agua dentro del análisis fotométrico, irradiando con luz UV en una cámara de extracción de flujo laminar, cinco muestras de aguas contaminadas estableciendo para cada una, el comportamiento de los contaminantes dentro de los parámetros mencionados en cinco intervalos de tiempo, encontrándose que, en cada uno de los casos la reducción es significativa tanto cualitativa como cuantitativamente y en el caso de la Fase 3, se evidencia que la reducción es de un ±80% para Dureza Total (Ca^{2+}) y ±90% para la presencia de Fosfatos

Resultados:

- **Dureza Total (Ca^{2+}):**

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Análisis por Espectroscopia UV-VIS de la Descomposición de Hojarasca de *Theobroma grandiflorum* en la Amazonia Colombiana

Beatriz Castrillón[a], Wilson Rodríguez[b,]*, Juan D. Claros[b], Juan C. Suárez[b]

[a] *Campus Utopía, Universidad de la Salle, Colombia.*
[b] *Centro de Investigaciones Amazónicas Macagual, Universidad de la Amazonia, Colombia*
* *Autor de correspondencia: w.rodriguez@udla.edu.co*

Palabras Claves: Humificación; mineralización; Caquetá; Copoazú

Introducción: La espectroscopia Ultravioleta-Visible (UV-VIS) ha permitido estudiar el grado de humificación de la materia orgánica de la hojarasca en un (agro)ecosistema. Así, el propósito del presente estudio fue determinar los índices espectrales en la región UV-VIS de hojarasca simple puesta a descomponer en bosque y sistema agroforestal (SAF) de diferente arreglo como forma de monitorear su proceso de humificación en el piedemonte de la Amazonia Colombiana. **Metodología:** El estudio se realizó en Florencia (Caquetá) para lo cual se colocó hojarasca de *Theobroma grandiflorum* en bolsas de descomposición de 2 mm (sin macroinvertebrados) y 20 mm (con macroinvertebrados) de tamaño de luz de malla, durante cinco meses (150 días) en el suelo de cinco sistemas agroforestales y un bosque secundario. Se estableció la química inicial (t= 0 días) de la hojarasca de *T. grandiflorum*. Además, se estudió algunas condiciones de extracción como el tiempo de agitación (2, 4 y 6 h), concentración de KOH (0,05 M, 0,1 M y 0,15 M) y masa de hojarasca (0,025 g; 0,050 g y 0,1000 g). Luego, se determinaron los siguientes índices espectrales UV VIS a t=0 días y t=150 días del ensayo en campo: A_{250}/A_{365}, A_{465}/A_{665}, A_{280}/A_{664}, A_{280}/A_{472}, A_{472}/A_{664}, A_{270}/A_{400}, A_{254}/A_{436}, A_{265}/A_{465} y $\Delta\log K=\log A_{400} - \log A_{600}$ en el extracto alcalino (EA). Todos los análisis se realizaron por triplicado.

Resultados: La química inicial de la hojarasca de *T. grandiflorum* mostró un material de baja calidad (C/N: 44.4; Lignina/N: 42.3 y Ca/K: 1.2). El estudio de optimización llevo a definir las siguientes condiciones de extracción: 2 h, KOH 0,15 N y 0,050 g de hojarasca tamizada a 1 mm. Con base a la pendiente de la curva espectral UV VIS de orden cero de EA se pudo establecer a t=150 días que la hojarasca puesta en bolsa de 2 mm en SAF presentó mayor grado de aromaticidad (humificación) comparado con las bolsas de luz de malla de 20 mm. **Conclusión:** Los índices $A_{465/A665}$, $A_{280/A664}$, $A_{472/A664}$ y $\Delta\log k$ fueron informativos del proceso de humificación de la hojarasca simple puesta a descomponer en bolsas de luz de malla de 2 mm y 20 mm.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-71-P EVALUACIÓN DE UN SISTEMA DE NANOPARTÍCULAS METÁLICAS ZNO Y BIMETÁLICAS ZNO/AG EN EL PROCESO DE FOTODEGRADACIÓN DE RODAMINA B.

EVALUACIÓN DE UN SISTEMA DE NANOPARTÍCULAS METÁLICAS ZnO Y BIMETÁLICAS ZnO/Ag EN EL PROCESO DE FOTODEGRADACIÓN DE RODAMINA B.

Ruiz-Carvajal Karen Alejandra [a], Sánchez, Leidy T [b*], Cañón–Ibarra, Andrés Felipe [c]

[a] Estudiante programa de Química. Universidad del Quindío
[b] Química. Docente Ingeniería de Alimentos. Universidad del Quindío
[c] Químico. Docente Zootecnia. Universidad del Quindío
Carrera 15 calle 12N
** e-mail karena.ruizc@uqvirtual.edu.co*

Palabras claves: Nanopartículas, foto degradación, Rodamina B, metálicas, bimetálicas.

Las nanopartículas (Nps) son estructuras altamente reactivas por sus características fisicoquímicas, morfológicas y de tamaño, que las hacen relevantes para su implementación en diferentes campos de la ciencia. En este sentido, existen nanopartículas metálicas, que son todas aquellas estructuras que poseen características únicas en cuanto al plasmón superficial y propiedades ópticas. A su vez, se encuentran las bimetálicas que se conforman por dos metales diferentes presentando propiedades útiles en procesos catalíticos o fotocatalíticos. En este proyecto de investigación se desarrollaron Nps bimetálicas de ZnO/Ag mediante el método de coprecipitación empleando como precursores $(CH_3COO)_2Zn$ y $AgNO_3$ e NaOH como agente precipitante para su posterior secado y calcinación, de este mismo modo se elaboraron nanopartículas metálicas de ZnO, empleando como precursor $(CH_3COO)_2Zn$. La caracterización de los sistemas sintetizados se llevó a cabo a través de espectroscopia UV-Vis, donde se determinó el plasmón superficial en un rango de 396 nm para las nanopartículas de ZnO y 385 nm para las nanopartículas de ZnO/Ag, además, del valor del band gap asociado a cada sistema. Posteriormente, la interacción entre los elementos de ambos sistemas ZnO y ZnO/Ag se definieron a través de espectroscopia FTIR observándose las bandas características del enlace oxígeno-metal por debajo de los 500 cm^{-1}. Por otra parte, su cristalinidad se determinó por medio de la Difracción de Rayos X (DRX) y utilizando la ecuación de Scherrer se obtuvo tamaños promedio entre 35 nm para las nanopartículas metálicas y 43 nm para las bimetálicas. Finalmente, se realizó la cinética de fotodegradación del colorante Rodamina B asistida por luz UV-Vis (Figura 1), donde se observó un efecto fotocatalítico de las nanopartículas generando un proceso de oxido-reducción entre las Especies Radicalarias de Oxígeno generadas y la estructura de la rodamina B, para la formación de CO_2, H_2O y otros productos. Lo anterior, se hizo evidente por la disminución del valor de absorbancia y concentración, determinada a través de espectroscopia UV-Vis (Figura 2). De igual forma se determinó el porcentaje de eficiencia entre los sistemas de nanopartículas metálicas ZnO y bimetálicas ZnO/Ag, convirtiéndose este último en el sistema más eficiente para el proceso degradativo mediado por luz.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

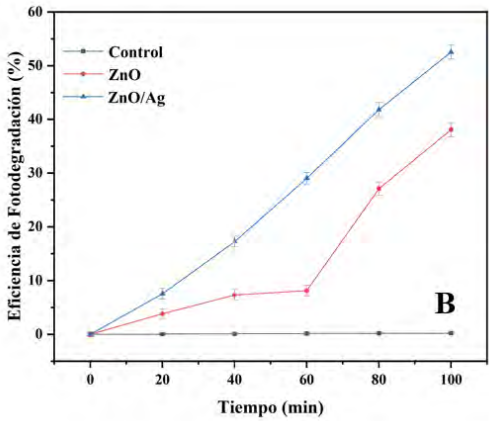


Figura 1. Eficiencia de la foto degradación de las nanopartículas metálicas ZnO y bimetálicas ZnO en presencia de luz UV-Vis para el colorante Rodamina B.

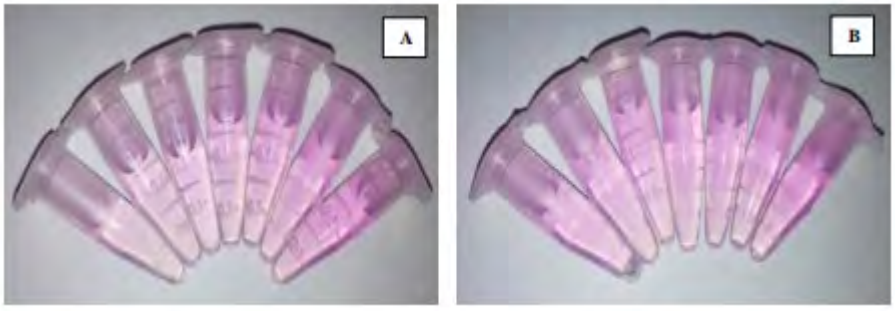


Figura 2. Eficiencia de foto degradación de las nanopartículas en el cambio de color en presencia de luz UV-Vis para el colorante Rodamina B. **A**. Nanopartículas metálicas ZnO/Ag. **B**. Nanopartículas bimetálicas ZnO

Referencias bibliográficas

Aguilar-Tapia, A., & Zanella, R. (2018). Las nanopartículas bimetálicas y algunas de sus aplicaciones. *Mundo Nano. Revista Interdisciplinaria En Nanociencia y Nanotecnología*, *10*(19), 72. https://doi.org/10.22201/ceiich.24485691e.2017.19.61783

Harish, K. K., Nagasamy, V., Himangshu, B., & Anuttam, K. (2018). Metallic Nanoparticle: A Review. *Biomed J Sci &Tech Res*, *4*(2). https://doi.org/10.26717/BJSTR.2018.04.001011

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-72-P ***TRATAMIENTO DE AGUA RESIDUAL INDUSTRIAL DE ORIGEN TEXTIL, EMPLEANDO LODOS ACTIVADOS***

Tratamiento de Agua Residual Industrial de Origen Textil, Empleando Lodos Activados

Juan D. Rivera Giraldo [a*] **Yaned M. Correa Navarro** [a] **Diana M. Ocampo Serna** [a]

[a] *Grupo de Estudios Ambientales en Agua y Suelo (GEAAS), Universidad de Caldas, Colombia*

* *Autor de correspondencia:* juan.rivera@ucaldas.edu.co

Palabras claves: Colorantes, remediación; lodos activados; tratamientos primarios y secundarios.

La industria textil en Colombia juega un papel fundamental en el desarrollo económico del país; sin embargo, no es posible ocultar el impacto negativo que sobre el ambiente provoca su agua residual; es por esto que se emplean diferentes métodos para la remoción de los subproductos presentes en agua de origen textil; no obstante, el uso de métodos químicos no es suficiente en la mayoría de los casos; por lo anterior, se hace necesario la utilización de métodos biológicos, y una de las opciones utilizadas como tratamiento secundario es el empleo de lodos activos debido a su eficiencia y su bajo coste. De tal manera, con este trabajo se planteó una alternativa de remediación al usar lodos activos para la biodegradabilidad de los subproductos generados en el proceso de tinción con colorante ácido negro 194, con lo cual se busca cerrar la brecha entre la academia y la industria, enfrentando el desafío que implica el tratamiento de aguas residuales industriales.

En este estudio se evaluó un método combinado de remediación, el cual constó de un tratamiento primario de electrocoagulación (EC) y un método biológico empleando lodos activos (LA). Los lodos fueron aireados y posteriormente combinados con medio mínimo en una relación 1:1. Seguido a esto se realizaron los ensayos de remediación, mezclando los lodos con el agua residual en diferentes proporciones. El experimento se mantuvo durante 96 horas periodo durante el cual se tomaron muestras para evaluar la Demanda Química de Oxígeno (DQO) por espectrofotometría. Los resultados mostraron disminución en la DQO cuando se utilizó el método combinado de tratamiento EC/LA, frente a la aplicación por separado de estos tratamientos. Además, se pudo comprobar que se genera una mayor remoción del colorante cuando se trabaja con concentraciones de lodo inferiores al 10.0%.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Síntesis de catalizadores metal-carbenos N-heterocíclicos (NHC) y evaluación de su actividad catalítica en condiciones ambientalmente sostenibles

Lizeth D. Prada. R[a*], Carlos A Osorio M [a], Lizeth J Alvarado[b], L. Diana Castañeda.[c]

[a] Grupo de Investigaciones Ambientales para el Desarrollo Sostenible (GIADS), Universidad Santo Tomas (USTA)- Bucaramanga
[b] Grupo de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas (GICIBAYA), Universidad Santo Tomas (USTA)- Bucaramanga, Colombia
[c] Universidad Nacional Abierta y a Distancia (UNAD)-ZOCC, Colombia
*E-mail: lizethdaniela.prada@ustabuca.edu.co

Palabras clave: catalizador, DES, cobalto-NHC, carbeno, rendimento.

Se planteó la síntesis de un catalizador de tipo metal-carbeno NHC mesoiónico mediante una serie de reacciones "click chemistry", metilación y reacciones de complejación con un metal de transición (Cobalto) utilizando solventes tradicionales y un solvente eutéctico (DES) a base de cloruro de colina- glicerol. Las reacciones a modo general se observan en la figura 1. Nuestra propuesta en el uso de los DES ofrece una nueva alternativa capaz de minimizar el impacto medioambiental de los disolventes, siendo este uno de los principios de la "Química Verde" y que su uso se está extendiendo a diferentes tipos de reacciones. La síntesis de estos catalizadores y la utilización de DES, revisten un alto potencial en los procesos industriales actuales de síntesis, con la ventaja de procedimientos sencillos y condiciones ambientalmente sostenibles.

Los compuestos obtenidos se caracterización mediante infrarrojo, resonancia magnética y puntos de fusión. Se evaluó la actividad catalítica del metal-carbeno NHC obtenido en reacciones de Biginelli. Estos procesos se compararon en términos de rendimientos de reacción. La complejación del catalizador se vio favorecida por el uso de DES, pese a que en la "Click chemistry" y la metilación el rendimiento fue menor a comparación de la vía tradicional. Para poder continuar evaluando su actividad catalítica es necesario realizar más pruebas en otras síntesis y caracterizar mediante técnicas como difracción de rayos x.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-74-P ***DESARROLLO DE UN SISTEMA DE NANOPARTÍCULAS METÁLICAS ENCAPSULADAS EN QUITOSANO PARA LA FOTODEGRADACIÓN DE AZUL DE METILENO***

Desarrollo de un Sistema de Nanopartículas Metálicas encapsuladas en Quitosano para la Fotodegradación de Azul de Metileno

Herrera–Gutiérrez, Elizabeth[a], Sánchez, Leidy T[b*], Cañón–Ibarra, Andrés Felipe[c]

[a] Estudiante programa de Química. Universidad del Quindío
[b] Química. Docente Ingeniería de Alimentos. Universidad del Quindío
[c] Químico. Docente Zootecnia. Universidad del Quindío
Carrera 15 calle 12N
** e-mail: ltsanchez@uniquindio.edu.co*

Palabras Claves: Quitosano; Nanopartículas; Colorantes; Fotodegradación; Adsorción.

La fotodegradación es una técnica que ha cobrado relevancia por poseer características que la hacen viable para su uso en biorremediación. Por otro lado, el uso de materiales de soporte aumenta la eficiencia de los sistemas obtenidos, como es el caso del quitosano. Por lo tanto, durante en esta investigación se desarrolló un sistema para la degradación de azul de metileno a pH 7 y 9, utilizando nanopartículas de ZnO, TiO_2 y ZnO:TiO_2 encapsuladas en gotas de quitosano. La síntesis de las nanopartículas se realizó mediante el método de coprecipitación utilizando $(CH_3COO)_2Zn$ e $Ti(CHO(CH_3)_2)_4$, seguida de un proceso de calcinación. La obtención del sistema se llevó a cabo por dispersión de las nanopartículas en quitosano al 2%, y posteriormente, formadas por goteo sobre una solución de NaOH. El seguimiento de la formación de las nanopartículas se realizó mediante espectrofotometría UV-Vis, encontrando el plasmón superficial en un rango de 335-389 nm, además, del comportamiento del band gap. Por otra parte, la interacción química del sistema ZnO/TiO_2 se observó a través de espectroscopia FTIR, donde se observa la banda correspondiente al enlace oxígeno-metal, característico para este tipo de sistemas. Adicionalmente, a través de análisis de Difracción de Rayos X se observó la estructura cristalina y utilizando la ecuación de Scherrer se obtuvo tamaños promedio entre 70 - 150 nm. La caracterización morfológica y funcional del soporte polimérico se realizó mediante Microscopía Electrónica de Barrido y capacidad de adsorción de agua. Las gotas de quitosano funcionalizada con nanopartículas de ZnO presentaron una mayor eficiencia al establecer la cinética de adsorción con porcentajes del 57.15% y 62.19% a pH 7 y 9 respectivamente (Fig,1). Por otro lado, se observó una eficiencia del 100% en la fotodegradación del colorante modelo por las nanopartículas funcionalizada en el quitosano a un pH 9 mientras que, las gotas de quitosano funcionalizada con nanopartículas de TiO_2 presentaron una mayor eficiencia con un porcentaje del 85.55% a pH 7 bajo irradiación UV-Vis (Fig.2) , presentando efecto fotocatalítico, evidente a través de la disminución de la absorbancia por espectrofotometría UV y ajustado al modelo matemático correspondiente siendo los sistemas más eficientes.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

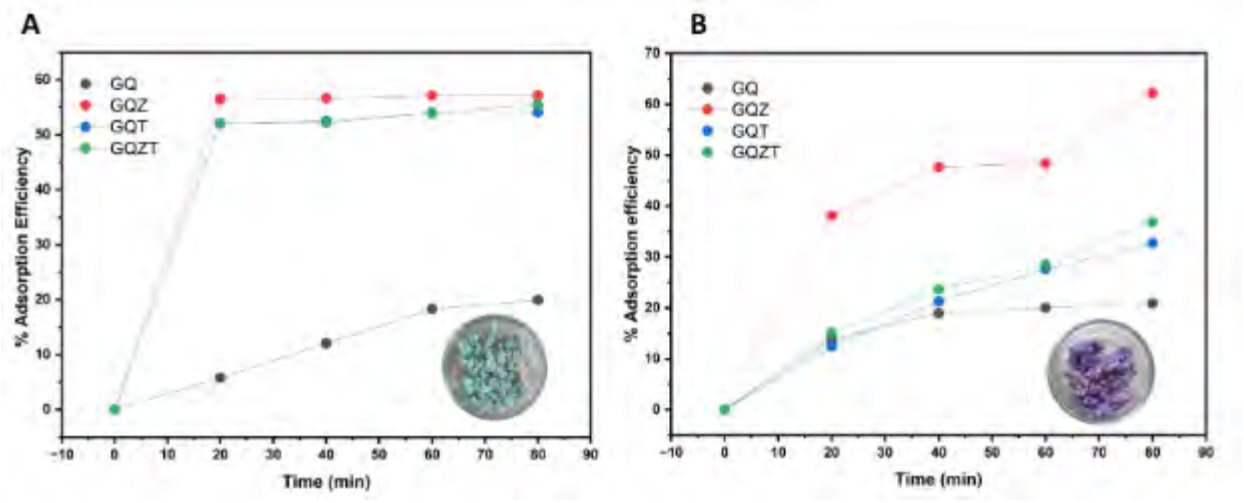


Figura 1. Eficiencia de la adsorción de la matriz polimérica de quitosano control y funcionalizada con nanopartículas de ZnO (GQZ), TiO_2 (GQT) y ZnO: TiO_2 (GQZT) en: A. Azul de metileno pH 7 y B. Azul de metileno pH 9.

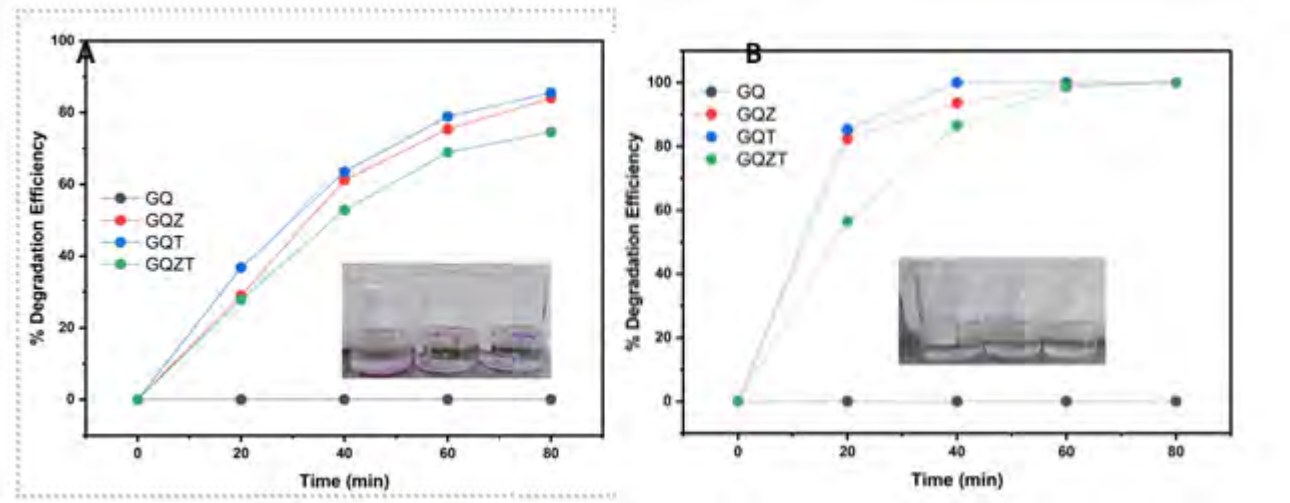


Figura 2. Eficiencia de fotodegradación de la matriz polimérica de quitosano control y funcionalizada con nanopartículas de ZnO (GQZ), TiO_2 (GQT) y ZnO: TiO_2 (GQZT) en: A. Azul de metileno pH 7 y B. Azul de metileno pH 9.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-75-P ***OBTENCIÓN DE UN MATERIAL ADSORBENTE A PARTIR DE BIOMASA FORESTAL CAUCANA Y SU EMPLEO EN LA REMOCIÓN DE PLAGUICIDAS***

Obtención de un Material Adsorbente a partir de Biomasa Forestal Caucana y su Empleo en la Remoción de Plaguicidas

Mónica Collazos; Rodrigo A. Sarria-Villa*; José A. Gallo-Corredor

Grupo de Investigación en Química Analítica Ambiental (GIQA), Departamento de Química, FACNED, Universidad del Cauca, Cll 5 # 4-70, Popayán, Colombia
**Autor de correspondencia: rodrigosv@unicauca.edu.co*

Palabras Clave: Taninos; adsorbente; plaguicidas; contaminación; agua

Resumen

Se preparó un material adsorbente a partir de taninos extraídos de la corteza de *Pinus patula* a través de la reacción de esterificación de Fischer empleando ácido oxálico y ácido clorhídrico, con el objetivo de evaluar su eficacia en la remoción del plaguicida 2,4 DDD (2,4 dicloro difenil dicloroetano). Para la determinación de las condiciones óptimas de síntesis se empleó el diseño experimental Box Behnken siendo la variable de respuesta la cantidad de adsorbente obtenido y las variables independientes: cantidad de ácido oxálico y catalizador, tiempo y temperatura; en total se llevaron a cabo 27 experimentos utilizando el programa *StartGraphics* para el análisis de datos. Por medio del análisis por espectroscopia infrarroja del extracto de taninos y del material adsorbente se encontró una banda característica en el espectro IR del material a 1700 cm^{-1} comprobando la formación del enlace éster. Para evaluar el porcentaje de remoción del plaguicida, se realizaron ensayos utilizando puntos aleatorios del diseño experimental los cuales dieron como resultado que las variables de síntesis no tenían una influencia significativa en el proceso de adsorción. Además, se observó que el porcentaje de remoción del plaguicida se situaba entre el 30% y 40%, este mecanismo de adsorción se atribuye principalmente a la formación de enlaces de transferencia de carga entre los anillos aromáticos del plaguicida y del polímero, la cuantificación se realizó a través de HPLC.

Referencias

Ibrahim, A., Yaser, A. Z., & Lamaming, J. (2021). Synthesising tannin-based coagulants for water and wastewater application: A review. Journal of Environmental Chemical Engineering, 9(1), 105007. doi:10.1016/j.jece.2020.105007

Brás, I. P., Santos, L., & Alves, A. (1999). Organochlorine Pesticides Removal by Pinus Bark Sorption. Environmental Science & Technology, 33(4), 631–634. doi:10.1021/es980402v

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-76-P MATERIALES BASADOS EN CELULOSA PARA LA REMOCIÓN DE METILPARABENO MEDIANTE PROCESOS DE ADSORCIÓN

Materiales Basados en Celulosa para la Remoción de Metilparabeno Mediante Procesos de Adsorción

Juan D. Rivera Giraldo [a*] **Yaned M. Correa Navarro** [a] **Juan D. Murcia García** [a] **Julio A. Cardona Castaño** [a]

[a] *Grupo de Estudios Ambientales en Agua y Suelo, Universidad de Caldas, Colombia*

**Autor de correspondencia:* juan.rivera@ucaldas.edu.co

Palabras clave: contaminantes emergentes; parabenos; adsorción; eliminación de contaminantes

Los contaminantes emergentes son sustancias químicas que se encuentran en bajas concentraciones, carecen de normatividad o regulación ambiental y generan afectaciones graves a la salud. Los sistemas convencionales de tratamiento de aguas no eliminan eficientemente este tipo de contaminantes, por ende, pueden retornar a los hogares y bioacumularse en los organismos. Dentro de este grupo de contaminantes se encuentran los parabenos, una familia de ésteres del ácido p-hidroxibenzoico utilizados como conservantes en cosméticos, productos farmacéuticos, alimenticios e industriales. Recientes investigaciones describen a los parabenos como disruptores endocrinos, lo cual puede provocar alteraciones como cáncer de mama y próstata, infertilidad, obesidad, Alzheimer y Parkinson. Entre las mejores alternativas de remoción de contaminantes se encuentra el proceso de adsorción, el cual puede usar materiales económicos, abundantes y susceptibles de modificación mediante la incorporación de grupos funcionales. En este sentido, la celulosa, un biopolímero que se encuentra en un porcentaje superior al 70% de la composición de la materia vegetal, puede ser una opción para la obtención de materiales que pueden ser empleados en la remoción de contaminantes.

En este trabajo de investigación se evaluó la adsorción de metilparabeno con materiales obtenidos a partir microcelulosa comercial. Este solido de partida se hidrolizó y modifico con ácido benzoico, mediante una reacción de esterificación, además, se generó un material magnético. Los materiales obtenidos se caracterizaron mediante microscopio electrónico de barrido (SEM), espectroscopía infrarroja con transformada de Fourier (FTIR), análisis termogravimétrico (TGA) y calorimetría diferencial de barrido (DSC). Por otra parte, para determinar la capacidad de adsorción de los materiales de celulosa modificados frente al metilparabeno, se realizaron ensayos de adsorción bajo diferentes parámetros analíticos como: la concentración y el tiempo. Los resultados experimentales fueron evaluados con varios modelos cinéticos y de isotermas para describir el mecanismo de adsorción y optimizar los equilibrios entre los adsorbentes y el adsorbato.

Finalmente, los resultados obtenidos permitieron concluir que los materiales de celulosa modificados presentaron porcentajes de remoción de metilparabeno por encima del 60% y que el material magnético presentó la mayor capacidad de adsorción.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Fotofiltro de carbón activado C@TiO2 para la reducción de contaminantes en fuentes de agua. Estudio Preliminar con Nitratos

William E. Albornoz[a*], Jeymy T. Sarmiento Monsalve[b].

[a] *Física del Medio Ambiente y Energía Solar (FMAES), Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Bogotá D.C, Colombia*
[b] *Carbones, Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Bogotá D.C, Colombia*
** Autor de correspondencia: weduardoa@udistrital.edu.co*

Palabras Claves: Fotocatálisis; Fotofiltro; Nitratos / Nitritos; C@TiO_2; Contaminantes;

Resumen

El carbón activado ha sido estudiado en los últimos años por las múltiples aplicaciones asociadas a la capacidad de absorción de contaminantes de distintas fuentes [48] y su formación de enlaces carbono-Metal [46], propiedades que están siendo aprovechadas en el presente trabajo, en el cual se sintetiza y evalúa la capacidad catalítica del "fotofiltro", que emplea como semiconductor TiO_2 y carbón mineral de tipo Bituminoso activado química y físicamente como material capaz de inmovilizar al metal y a su vez absorber especies contaminantes.

El fotofiltro (C@TiO_2) generado fue caracterizado a través de Análisis Último, Análisis Elemental, Infrarrojo y Microscopía Electrónica de Barrido. Este nuevo material fue utilizado para la reducción de nitratos, irradiando la muestra junto con el fotofiltro en luz UVA por 1 hora, y evaluando los productos obtenidos a través del método de colorimetría por Griess [25], encontrando que al tiempo seleccionado el fotofiltro (C@TiO_2) es capaz de reducir un 20% de Nitratos presentes.

Cabe resaltar que se hicieron estudios en fase homogénea con el fin de evaluar las ventajas del catalizador heterogéneo y así mismo se evaluó si el "Fotofiltro" es capaz de emplearse en más de una reacción de reducción encontrando que C@TiO_2, es más útil en fase heterogénea que homogénea y que además es capaz de realizar más de un ciclo de reacción.

Con esta investigación preliminar sé busca solucionar una de las problemáticas medioambientales que viven hoy en día algunos países en vía de desarrollo el cual es la escasez de agua potable por la contaminación de la misma aportando directamente al desarrollo sostenible desde la investigación en química.

Algunos resultados encontrados son:

Tabla 1. Lecturas de Nitritos por espectrofotometría a 543 nm, comparativa Homogéneo/Heterogéneo

Muestra	Lynch inicial después de la 1 hora (heterogéneo)	Lynch después del tercer barrido con muestra Estándar (heterogéneo)	Barrido con muestra estándar 1 hora sin lavar (homogéneo)
Absorbancia	1,605	1,736	1,734
Concentración Nitratos, Nitritos no solubles, Amoniaco y nitrógeno gaseoso	1036,77 mg/L	1021,63 mg/L	1021,77 mg/L
Concentración Nitritos solubles	163,23 mg/L	178,36 mg/L	
Concentración de Nitritos Totales	163,23 mg/L	178,36 mg/L	178,23 mg/L

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

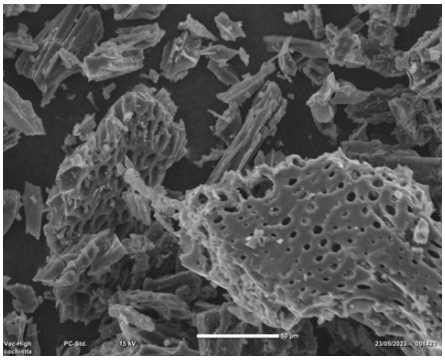


Imagen 1. Análisis en SEM carbón Activado Experimentalmente después de tres Utilizaciones

Mecanismo de acción adaptado a las reacciones de Óxido-Reducción del Dióxido de Titanio (TiO_2) para la presencia de Nitrato de Sodio, propuesta por nosotros:

$$NaNO_3 + H^+ + OH^- + e^- \xrightarrow[\text{Catalizador}]{\text{UV}} NaNO_2 + HNO_2 + NaOH + O_2 + NH_3 + N_2$$

Referencias.

[4] Directivas Europeas 91/271/CEE. 1998. Tratamiento de las aguas Residuales Urbanas. Normativa española por el R. D. Ley 11/1995, el R. D. 509/1996, el R. D. 2116/1998.

[5] FAO. El agua en las estadísticas mundiales de la FAO. 2020. http://www.fao.org/3/ca9695es/CA9695ES.pdf

[7] Herrmann JM. Heterogeneous photocatalysis: fundamentals and applications in the removal of various types of aqueous pollutants. Catal Today. 1999;53(1):115-129.

[8] Jaramillo CA. La fotocatálisis: Aspectos fundamentales para una recuperación de contaminantes. Universidad de Caldas. 2006:71-88.

[21] Organización de las Naciones Unidas. Objetivos de Desarrollo Sostenible. ONU-Agua. Recuperado el 4 de abril de 2023, de https://www.unwater.org/goal-6/

[22] ONU. Objetivo 6: Agua limpia y saneamiento. https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/water-and-sanitation/

[25] Eaton AD, Rice EW, Baird RB, Clesceri LS. Standard Methods For the Examination of Water and Wastewater. 22nd Edition. Washington, DC: American Public Health Association, American Water Works Association, Water Environment Federation; 2012.

[46] Gupta VK, Pathania D, Agarwal S. Adsorption of Heavy Metals on Carbon Nanotubes: A Review. J Environ Manage. 2018;217:56-74. doi: 10.1016/j.jenvman.2018.03.065

[48] Wang Y, Wang S, Su X, Huang J, Zhao Q, Yan X. Application of Activated Carbon in Water Treatment: A Review. J Environ Sci. 2018;63:142-157. doi: 10.1016/j.jes.2017.05.037

[55] Albornoz WE, Delgado Gómez MA, Forero Chacón NL. ESTUDIO PRELIMINARES SOBRE PURIFICACIÓN DE AGUAS. REDUCCIÓN DE CONTAMINANTES EN AGUAS POR MEDIO DE RADIACIÓN UVB ARTIFICIAL IMPLEMENTANDO FOTOCATÁLISIS. Trabajo de Grado. Universidad Distrital Francisco José de Caldas. Bogotá, D.C. Colombia. 2023.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-242-P ANÁLISIS DE LAS EMISIONES DE HIDROCARBUROS AROMÁTICOS POLICÍCLICOS QUE AFECTAN LA CALIDAD DEL AIRE EN LA CIUDAD DE MANIZALES, POR MEDIO DE UNA TECNOLOGÍA DE AVIONES NO TRIPULADOS ACOPLADOS A SPME

Análisis de las Emisiones de Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos que Afectan la Calidad del Aire en la Ciudad de Manizales, por Medio de una Tecnología de Aviones no Tripulados Acoplados a SPME

Cesar A. Ossa -Jaramillo[a], Jhon F. Fiscal -Ladino*[b], Milton Rosero -Moreano[c]

[a] *Grupo de Investigación en Cromatografía y Técnicas Afines, Universidad de Caldas, Colombia*
[b] *Grupo de Investigación en Cromatografía y Técnicas Afines, Universidad de Caldas, Colombia*
[c] *Grupo de Investigación en Cromatografía y Técnicas Afines, Universidad de Caldas, Colombia*

* *Autor de correspondencia:* jhon.fiscal@ucaldas.edu.co

Palabras Claves: HAPs; contaminación; GC-FID; fenantreno.

La emisión de contaminantes generados por la oxidación y pirólisis de materiales orgánicos podría ser extremadamente peligrosa para la salud humana, siendo un tema importante a ser considerado, especialmente durante las operaciones a gran escala, tales como los llevados a cabo por las industrias y el sector transporte. Entre las diferentes clases de contaminantes, están los hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs, por sus siglas en inglés), que son uno de los compuestos más tóxicos que se conocen, junto con las dioxinas y bifenilos clorados. La US -EPA ha clasificado 16 HAPs como contaminantes prioritarios debido a sus características más tóxicas, siendo esta lista considerada como una referencia en la evaluación de muestras ambientales. En Colombia el Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible con apoyo de Ministerio de Minas y Energía, es el ente encargado de regular las emisiones de gases. La reglamentación colombiana en materia de calidad de combustibles tiene su raíz en la Resolución 898 de 1995. La Resolución 40619 de 30 de junio de 2017 estableció de manera temporal un parámetro de contenido de HAPs, en promedio mensual máximo de 8 % en masa, con picos máximos de 11%, el cual tuvo vigencia hasta el mes de junio de 2019. Con relación al estudio sobre HAPs en el país, se encuentran mediciones en ciudades tales como Pamplona, Medellín, Cúcuta, Bogotá, Cali entre otras, en cuerpos de agua, alimentos y en la atmósfera. En la ciudad de Manizales, aparece el reporte de un estudio preliminar solo en PM 10 en el año 2013 y para el 2020, se encuentra una investigación realizada por la Universidad Nacional de Colombia, y hallaron un rango de concentraciones totales sobre los 16 HAPs prioritarios que oscila entre 15.5 ng/ m 3 y 46.0 ng/m. Por medio de la integración del sistema drone-SPME, se pretende muestrear varias zonas de la ciudad de Manizales, para la detección e identificación de PAHs y establecer relaciones de diagnóstico y las posibles fuentes de emisión.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-263-P ***EVALUACIÓN DE UN CARBÓN ACTIVADO OBTENIDO A PARTIR DEL CUESCO DE PALMA DE ACEITE PARA SER USADO EN PROCESOS DE ELECTRO-OXIDACIÓN EN LA DEGRADACIÓN DE TOLUENO***

Evaluación de un Carbón Activado Obtenido a partir del Cuesco de Palma de Aceite para ser Usado en Procesos de Electro-Oxidación en la Degradación de Tolueno

Miller A, Ordoñez [a], Yubeira K, Sánchez [b], Juan C, Amézquita [*]

[a] *Instituto Universitario de la Paz, UNIPAZ, Colombia*
[b] *Instituto Universitario de la Paz, UNIPAZ, Colombia*
[*] *Autor de correspondencia*: juan.amezquita@unipaz.edu.co

Palabras Claves: carbón activado; impregnación con hierro; tratamiento hidrotermal; electro-oxidación.

En Colombia en los últimos años se posicionó como el primer productor de palma de aceite en América Latina, y el cuarto a nivel mundial. Con 91 774 hectáreas sembradas en el departamento de Santander equivalentes al 15.55% de la producción nacional con 590 188 hectáreas.

En el presente trabajo se evalúan las propiedades de un carbón activado (CA) a partir del cuesco de palma de aceite activado químicamente con ácido fosfórico en relación 2:1 (ácido: cuesco) e impregnado con hierro mediante tratamiento hidrotermal con microondas con la metodología propuesta por Yürum y posteriormente ser empleado en procesos de electro-oxidación. En primera instancia, se realizó un análisis próximo del CA obtenido (Tabla 1) donde se determina el rendimiento, la humedad y cenizas presente en la biomasa.

Tabla 1. Resultados del análisis próximo.

Biomasa	Rendimiento Carbonización	pH	Humedad (%)	Cenizas (%)
Cuesco	74.8 %	6	13.40	1.54

Nota: Elaborada por autores.

Respecto a la caracterización de adsorción, se desarrolla el proceso de adsorción de tolueno sobre el CA con soluciones 2 a 20 ppm, la muestra carbonizada (CAC) e impregnada (CAI), con el fin de hacer una comparación, donde el CAC tuvo un porcentaje de remoción en un 23,80% y el CAI de 25,44%. Por ende, se concluye que la impregnación con Fe de los CA desarrolla una mejoría en la adsorción de tolueno. Además, los avances de la investigación indican que puede ser una alternativa prometedora para la adsorción de compuestos orgánicos.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-271-P NIVELES DE TRIHALOMETANOS Y ÁCIDOS HALOACÉTICOS EN AGUAS DE PISCINAS Y SU ASOCIACIÓN CON PARÁMETROS DE CALIDAD DEL AGUA

Niveles de Trihalometanos y Ácidos Haloacéticos en Aguas de Piscinas y su Asociación con Parámetros de Calidad del Agua

William A Hernandez[1, 2], Olga I Vallejo-Vargas[1, 2], Edwin J. Alzate-Rodríguez [1, 2], Carlos H Montoya-Navarrete [1, 2], Leonardo Beltrán-Angarita[1, 2, 3]*

[1]. *Water Resource Study Group (GERH), School of Chemistry, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.*
[2]. *Water and Food Analysis Laboratory, School of Chemistry, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.*
[3]. *Faculty of Health Sciences, Unidad Central del Valle del Cauca, Colombia.*

* Corresponding author.
e-mail: lbeltran@uceva.edu.co, lbeltran@utp.edu.co . Universidad Tecnológica de Pereira. La Julita, Pereira, Colombia.

Palabras Claves: 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.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-277-P ***REMOCIÓN DE FOSFATO EN SOLUCIÓN ACUOSA EMPLEANDO SOLIDOS DERIVADOS DEL SISTEMA HIDROTALCITA-CARBÓN ACTIVADO***

Ivan Baena-Cogollo [a], Wimer Orozco Cruz [a], Edinson Castellar [a], Johana Rodriguez Ruiz [b], Edgardo Meza-Fuentes

[a] *Grupo de Estudios en Materiales y Combustibles, Universidad de Cartagena, Colombia*
[b] *Centro Para la Industria Petroquímica-SENA, Cartagena, Colombia*
* *Autor de correspondencia: emezaf@unicartagena.edu.co*mailto:email@xxx.yyy.zzz

Palabras Claves: Fosfato; carbón activado, hidrotalcita cinética

El anión fosfato es un macronutriente esencial para todas las formas de vida, siendo un factor limitante para la productividad biológica en muchos entornos terrestres y marinos. También desempeña un rol importante en la molécula del ADN/ARN y está relacionado con el transporte de energía a la célula vía ATP. El fosfato en exceso en el medio ambiente puede causar el fenómeno de eutroficación agotando el oxígeno en cuerpos de agua y produciendo la muerte de especies acuáticas. Adicionalmente en seres humanos puede causar daño en los riñones y osteoporosis, por lo que la remoción de fosfato de los efluentes acuosos es de vital importancia. En este trabajo se sintetizaron hidrotalcitas de MgAl en los poros de carbon activado, de manera a generar proporciones de 5.0 (CA-5.0D), 7.5 (CA-7.5) y 10.0 % (CA-10.0D) de la mezcla oxido de magnesio-oxihidróxido de aluminio en los sólidos finales por procesos de calentamiento a 573 K. Los materiales fueron caracterizados por Los sólidos sintetizados fueron caracterizados a través de técnicas de espectrometría en la región del infrarrojo medio con transformada de Fourier (FTIR), difracción de rayos X (DRX), análisis termogravimétrico (TGA), medida del área superficial específica y porosimetría por adsorción de nitrógeno a 77 K. La adsorción del anión fosfato se efectúo en soluciones a 50 y 100 ppm. La fase hidrotalcita fue detectada en los materiales con las proporciones 5.0 y 7.5 %. Todos los materiales adsorbieron el anión fosfato, siendo el mas efectivo el material CA-5.0, el cual removió porcentajes superiores al 90 %, como se muestra en la figura 1. 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 fosfato es un proceso espontáneo a temperatura de 298 K y de naturaleza exotérmica.

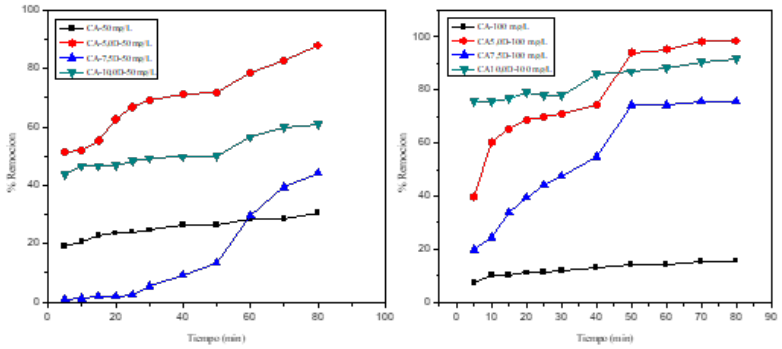


Figura 1. Remoción de fostato de soluciones a 50 y 100 ppm, empleando carbon activado (CA) y los sistemas carbón activado-hidrotalcita a diferentes porcentajes de contenido.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-280-P OPTIMIZACIÓN DE LA DEGRADACIÓN FENTON HETEROGÉNEO FOTOASISTIDO DE CONTAMINANTES EMERGENTES EN AGUAS RESIDUALES DOMÉSTICAS ACTIVADA POR NITRURO DE CARBONO GRAFÍTICO DOPADO CON FE (FE-G-C3N4)

Optimización de la Degradación Fenton Heterogéneo Fotoasistido de Contaminantes Emergentes en Aguas Residuales Domésticas Activada por Nitruro de Carbono Grafítico Dopado con Fe (Fe-*g*-C_3N_4)

Evelyn A. Burbano[a], Carlos A. Vallejo[a], Ana M. García[a], Arsenio Hidalgo[b], Luis A. Galeano[a,*]

[a] *Grupo de Investigación en Materiales Funcionales y Catálisis (GIMFC), Universidad de Nariño, 520002 Pasto-Colombia.*

[a] *Centro de Asesorías en Estadística (CEASE), Universidad de Nariño, 520002 Pasto-Colombia.*

** Autor de correspondencia: alejandrogaleano@udenar.edu.co*

Palabras Claves: Contaminantes de preocupación emergente; Fenton heterogéneo; Aguas residuales domésticas; Diseño estadístico de experimentos.

Se optimizó la degradación de 8 contaminantes de preocupación emergente (CEs, 2,0 mg/L de cada uno), 4 de tipo agrotóxico (Metamidofos, Carbaril, Carbofurán y Clorpirifos) y 4 de tipo farmacéutico (Ibuprofeno, Acetaminofén, Naproxeno y Doxiciclina), disueltos en un modelo sintético de aguas residuales domésticas, mediante la reacción Fenton heterogéneo catalizada por nitruro de carbono grafítico dopado con Fe (Fe-*g*-C_3N_4), y fotoasistida por radiación visible (lámparas de Xe de 35 Watts x 2). Se empleó un diseño estadístico de experimentos central compuesto (CCD) 2^3, con la dosis de Fe activo, la dosis de peróxido y el pH como factores experimentales, y las siguientes respuestas alimentando la función Deseabilidad para construir la superficie multirrespuesta: máxima eliminación de CEs (40 %), mineralización de Carbono Orgánico Disuelto COD (20 %), eliminación de color (10 %), fracción del peróxido reaccionado (15 %), y mínima lixiviación de Fe en el efluente de reacción (15 %). A partir de 23 experimentos se determinaron las condiciones óptimas de operación del sistema catalítico heterogéneo (Tabla 1), con un excelente coeficiente de determinación, superior al 94 % de ajuste.

Tabla 1. Condiciones óptimas de reacción del sistema Fenton Heterogéneo Fe-*g*-C_3N_4 fotoasistido por luz visible en la degradación de los CEs de interés disueltos en un modelo sintético de Materia Orgánica Natural: ([MON + CEs]$_0$ = 43,9 mg COD/L).

Proceso de oxidación			Fenton Homogéneo fotoasistido	Fenton Heterogéneo fotoasistido
Coeficiente de determinación R^2			0,9982	0,9437
Factor experimental	**Nivel Bajo**	**Nivel Alto**	**Óptimo**	**Óptimo**
Concentración de Catalizador (mg Fe/L)	16,4	83,6	41,24	39,55
Dosis de peróxido (mg H_2O_2/mg COD * mg Fe)	1,65	12,12	2,20	4,18
pH	2,58	8,12	2,71	3,34

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Bajo condiciones óptimas de reacción y 17,0 +/- 0,2 °C, el sistema catalítico logró la degradación del 83 % de los CEs, mineralizar 43 % del COD, 45 % de decolorización, aprovechar el 95 % del H_2O_2, demostrando una excelente estabilidad del sitio activo sobre la superficie del nitruro funcionalizado (concentración de Fe en el efluente de reacción de 1,8 $*10^{-3}$ mg Fe/L, después de 3 horas de reacción). En comparación con el sistema Fenton Homogéneo fotoasistido (previamente optimizado), el sistema Fenton Heterogéneo requirió una concentración similar de Fe activo, un pH un poco menos ácido, aunque una mayor dosis de peróxido en un factor aproximado de 2:1, lo cual se compensa ampliamente por la ventaja de no tener que recuperar el metal activo disuelto desde el agua descontaminada. Al incrementar el pH a 7,0, el sistema aún logro degradar el 66 % de los CEs y aprovechar el 70 % del peróxido de hidrógeno.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-293-P ***EVALUACIÓN PRELIMINAR DE COMPUESTOS ORGÁNICOS VOLÁTILES TOLUENO, ETIL BENCENO Y XILENO (TEX), MEDIANTE UN MUESTREO PASIVO EN EL MUNICIPIO DE POPAYÁN.***

Evaluación Preliminar de Compuestos Orgánicos Volátiles Tolueno, Etil benceno y Xileno (TEX), mediante un Muestreo Pasivo en el Municipio de Popayán

Víctor A Gómez* [a], **Andrea C Cabanzo*** [b]

[a] *Grupo de investigación en química de compuestos bioactivos, Universidad del Cauca, Colombia*
[b] *Grupo de investigación en química de compuestos bioactivos, Universidad del Cauca, Colombia*

** Autor de correspondencia: victorgomez@unicauca.edu.co, acabanzo@unicauca.edu.co*

Palabras Claves: Cromatografía de gases; tolueno; etil benceno; xileno.

Este trabajo presenta el primer estudio de recolección de muestras de orgánicos volátiles tolueno, etilbenceno, xileno del aire ambiental en la cuidad de Popayán, utilizando captadores pasivos para el diagnóstico; y cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS) para la identificación y su cuantificación. Inicialmente se realizó el acondicionamiento del método de cuantificación, efectuando algunas modificaciones a los métodos NIOSH 1501 Y EPA TO-17, concernientes a la elección de las condiciones cromatográficas, selección del solvente de extracción y selección del patrón interno. La construcción de los captadores pasivos se realizó con carbón activado como absorbente y vidrio como material del contenedor. La campaña de muestreo se efectuó según parámetros de la EPA, vías de transporte principales y estaciones de combustibles presentes en la ciudad. El método de validación tuvo en cuenta la selectividad; límites de detención y cuantificación; precisión; exactitud; linealidad; y recuperación. El proceso de extracción de los analitos de interés presentes en los captadores se realizó con una disolución de etil acetato, agitación con ultrasonido y filtración por membrana de celulosa de 0.25µm. Las inyecciones de las muestras en GC-MS contempló una temperatura de inyección a 250°C, modo de inyección en Splitless, volumen de inyección 1µg, flujo de la columna 1.50 mL/min, columna analítica TG-5MS y se estableció las rampas de temperatura al inicio de 45°C por 2 min, con incremento de 10°C/min hasta los 150°C por 3 min y se finalizó con el incremento de 20°C/min hasta los 220°C por 3 minutos. Esta evaluación permitió diagnosticar la presencia de TEX en los 18 puntos de muestreo ubicados al interior del área urbana de la cuidad, indicando que la concentración máxima reportada para tolueno fue de 21.37 µg/m^3, para el etilbenceno 10.80 µg/m^3 y para el xileno de 19.23 µg/m^3. Se puede concluir que los niveles de tolueno, etilbenceno y xileno obtenidos en Popayán están por debajo del límite máximo recomendado por la OMS. Sin embargo, se observan diferencias significativas respecto a otras ciudades como Manizales, con características similares de población y parque automotor.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Comparación De Adsorbentes De Cáscara De Plátano (*Musa Paradisiaca*) Verde Y Madura En La Remoción De Metales Pesados Cd y Pb En Agua Contaminada

María C. Castaño[a], Natalia Ortega[b]

a,b Diseño de nuevos productos
universidad del Quindío, Armenia, Colombia
Correspondencia: mariac.castanop@uqvirtual.edu.co

Palabras clave: Adsorbente; cáscara de plátano; metales pesados; contaminante

Las fuentes de aguas residuales provenientes de procesos industriales y agrícolas contienen grandes cantidades de metales como cromo, cadmio, cobre, mercurio, plomo y zinc, que genera un impacto ambiental negativo y en la salud de las personas. Por ello se han desarrollado diferentes métodos para el tratamiento de estas aguas, uno de ellos es el proceso de bioadsorción empleando biomasa residual como cortezas de árboles, hojas, tallos y cáscaras, conocidos como adsorbentes. En esta investigación se evaluó la capacidad de adsorción de Cd y Pb por las cáscaras de plátano verde y madura, teniendo como objetivo general evaluar la capacidad de remoción de metales pesados Cd y Pb en agua contaminada por adsorbentes obtenidos a partir de las cáscaras de plátano verde y las cáscaras de plátano maduro. Se variaron dos parámetros: el tamaño de partícula (845 µm, 400 µm y 250 µm) y la cantidad de harina de las dos cáscaras (0,02, 0,1 y 0,15 g/mL). Este estudio consistió en analizar el agua contaminada que se obtiene de los análisis del equipo de adsorción atómica, durante el proceso de adsorción se varió también el tiempo de contacto del adsorbente con la solución contaminada. Los resultados muestran un porcentaje máximo de adsorción de 75% para el Pb y 80% para el Cd. El tiempo de remoción que mostros mejores resultados fue de 2 horas. El análisis estadístico muestra que, a mayor concentración de cáscara, mayor % de adsorción para el Cd y el Pb; el pH ligeramente ácido (6,9 y 5,4) favoreció la adsorción, debido a que el grado de protonación de la superficie de la cáscara aumenta y, en consecuencia, también aumenta la bioadsorción de los metales pesados.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-348-P ***IMPACTO AMBIENTAL POR TOXICIDAD DE CROMO EN AGUA DE RIEGO PROVENIENTE DEL RIO TUNJUELO BOGOTÁ D.C***

Impacto Ambiental por Toxicidad de Cromo en Agua de Riego Proveniente del Rio Tunjuelo Bogotá D.C

Daniel S Buenhombre Nuñez [a], Nerinder X López García [b*], Dora L Gómez Aguilar [c]

[a] *Universidad Pedagógica Nacional, Bogotá Colombia*
[b] *Universidad Pedagógica Nacional, Bogotá Colombia*
[c] *Universidad Pedagógica Nacional, Bogotá Colombia*
* *Autor de correspondencia:* nxlopezg@upn.edu.co

Palabras Claves: Bioacumulación; Contaminación; Cromo Hortalizas; Rio Tunjuelo.

El cromo es un elemento químico de numero atómico 24 y se encuentra en el grupo 6 de la tabla periódica, es un metal pesado, presenta 2 estados de oxidación estables, el primero es el cromo trivalente que es necesario para el cuerpo humano, pero en grandes cantidades es tóxico, el segundo es el cromo hexavalente el cual se considera cancerígeno para los seres vivos, las sales y sulfatos de cromo son utilizados en las industrias como la galvanoplastia, curtiembres, entre otras. Los residuos generados por las industrias específicamente las curtiembres son depositados al rio Tunjuelo el cual es uno de los principales ríos que recorre la ciudad de Bogotá. Específicamente en el barrio de Bosa San Bernardino y en la vereda Bosatama, las aguas de este rio son utilizadas como aguas de riego en cultivos de hortalizas para luego estas ser vendidas y consumidas. En concordancia a lo anterior, el propósito es identificar cromo total, cromo hexavalente y cromo trivalente en hortalizas específicamente la Acelga en las fases de crecimiento desde la semana inicial hasta la semana final, por medio de los métodos analíticos de Espectrofotometría de Absorción Atómica, Espectrofotometría visible, en la determinación del cromo trivalente se realiza la diferencia entre los dos métodos dando como resultado la cantidad de cromo trivalente.

Teniendo en cuenta lo anterior, se encuentra la necesidad de poder actuar ante la problemática ambiental que sucede en el rio Tunjuelo, de esta forma esta investigación busca determinar la prevención y el análisis del cromo en hortalizas para que los estudiantes se apropien de las cuestiones ambientales y lo entiendan desde la química por medio de los diferentes métodos analíticos aplicados para la determinación de cromo en hortalizas. En forma de conclusión se espera observar como la cantidad de cromo va aumentando en las fases de crecimiento por semana y en que parte de la planta se bioacumula la mayor concentración sea en la parte comestible (hojas y tallos) o en la parte no comestible (raíces), dependiendo de esto podemos decir si en el consumo humano se están ingiriendo o no mayores concentraciones de cromo.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Contaminación por Mercurio en Colombia: Una Visión General

Wilder L Gamboa [a,*]

[a] *Facultad de Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Militar Nueva Granada, Colombia.*
[*]*wilder.gamboa@unimilitar.edu.co*

Palabras Claves: Mercurio; Concentración total de mercurio; minería artesanal; Colombia.

A pesar de los incansables esfuerzos que la comunidad científica y las entidades de supervisión han venido realizando, resulta innegable que la problemática ambiental relacionada con la presencia de mercurio en Colombia aún perdura de manera significativa. Este continuo desafío se deriva principalmente de la falta de adopción de prácticas amigables con el entorno, la ausencia de políticas preventivas con enfoques definidos y la insuficiente dedicación a la investigación científica en este ámbito dentro del país.

Dentro del contexto de esta revisión, se ha llevado a cabo una revisión bibliográfica orientada hacia la problemática de contaminación por mercurio en Colombia. El propósito central de esta revisión radica en la obtención de información detallada acerca de la presencia del mercurio y su dispersión en diversas matrices ambientales como suelos, sedimentos, aire, agua, así como su entrada en las cadenas tróficas. A partir de esta información recopilada, se ha trazado un diagnóstico en relación con el grado de degradación ambiental propiciado por la presencia de mercurio, lo cual a su vez constituye el punto de partida esencial para investigaciones futuras centradas en el análisis químico del mercurio en el contexto colombiano.

Los resultados obtenidos revelan que el mercurio se emite principalmente como resultado de la minería artesanal del oro, y se encuentra presente en diversas matrices ambientales, incluyendo suelos, sedimentos, agua y la cadena trófica. Además, es importante señalar que en ciertos casos, las concentraciones de mercurio detectadas sobrepasan los límites que han sido establecidos tanto a nivel nacional como internacional en materia de regulación ambiental. El impacto ambiental y las posibles implicaciones en la salud pública derivadas de la presencia de mercurio en Colombia son incuestionablemente significativos. En este sentido, la presente revisión ejemplifica con contundencia la necesidad de enfocar y fomentar la investigación científica en torno a la comprensión profunda de la ocurrencia, el origen y la distribución del mercurio en el contexto colombiano. Solo a través de esta comprensión exhaustiva se podrá trazar una estrategia efectiva para abordar esta problemática de manera integral, minimizando sus efectos adversos en el medio ambiente y en la salud pública.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Estudio preliminar de la oxidación catalítica homogénea de un colorante azoico con el sistema Co^{2+}/persulfato

Julio A. Cardona Castaño [a*] **Luis G. Matallana Pérez** [b] **Nancy R. Sanabria González** [c]

[a,b] *Grupo de Estudios Ambientales en Agua y Suelo, Universidad de Caldas, Manizales, Colombia*

[c] *Grupo de Procesos Químicos, Catalíticos y Biotecnológicos, Universidad Nacional de Colombia, sede Manizales, Colombia*

**Autor de correspondencia:* julio.cardona_c@ucaldas.edu.co

Palabras clave: persulfato; azoico; azorrubina; oxidación.

A nivel mundial, el mercado de la industria textil es de 1 billón de dólares, contribuye con el 7% del total de las exportaciones globales y emplea a unos 35 millones de trabajadores. No obstante la importancia económica, 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, estimado en 200 mil millones de litros anuales. Pequeñas concentraciones de colorantes (1 a 10 ppm) pueden contaminar grandes volúmenes de agua. En las plantas de tratamiento de aguas residuales convencionales la remoción de colorantes es limitada. Estos compuestos al adsorber luz a distintas longitudes de onda afectan la actividad fotosintética de las algas, ocasionando un descenso en el contenido de oxígeno disuelto y un desbalance en los organismos acuáticos. 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 considerados tratamientos ecológicos que pueden degradar una variedad de contaminantes, al generar especies reactivas de oxígeno (reactive oxygen species, ROS) que transforman los contaminantes en moléculas más pequeñas con baja toxicidad, llegando a una mineralización parcial (generación de CO_2 y H_2O). En los POAs basados en el radical sulfato ($SO_4^{\cdot-}$), los metales de transición activan el persulfato (PS, $S_2O_8^{2-}$) a través de mecanismos de transferencia de electrones para generar estas especies. Entre los metales de transición empleados para la activación de persulfato, el cobalto es considerado el más eficiente. En este trabajo se estudió preliminarmente la activación catalítica de persulfato de potasio con cobalto como metal de transición (sistema Co^{2+}/PS) para la oxidación del colorante azoico azorrubina en medio homogéneo. Se analizó la influencia de factores como [Co^{2+}], [PS] y pH alcalino. Las variables respuesta para el seguimiento de la reacción fueron la decoloración y la remoción de carbono orgánico total (COT). Los ensayos de oxidación se realizaron bajo condiciones suaves (presión atmosférica y 25°C) y tiempo de reacción de 5 h. Con este sistema de oxidación se ha logrado decoloración total (100%) y remociones de COT hasta del 30%, lo cual sugiere que el sistema Co^{2+}/PS es una tecnología potencial para el tratamiento de vertimientos coloreados.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-459-P ***ANÁLISIS DE LA VELOCIDAD DE DIFUSIÓN DE NH4CL ENCAPSULADO EN CA5(PO4)3(OH) OBTENIDO DE PECES DE TILAPIA ROJA (OREOCHROMIS SPP.) Y ALGINATO DE SODIO OBTENIDO DE SARGASSUM VULGARE***

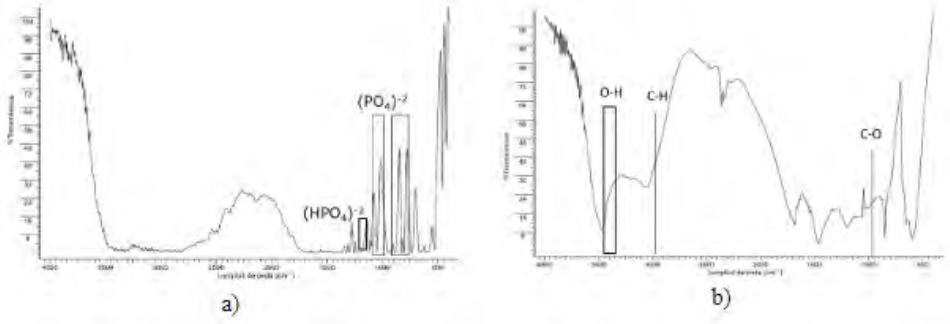
Análisis De La Velocidad De Difusión De NH_4Cl Encapsulado En $Ca_5(PO_4)_3(OH)$ Obtenido De Peces De Tilapia Roja (*Oreochromis spp*.) y Alginato De Sodio Obtenido De *Sargassum vulgare*

Natalia Vargas[a], Paula A. Lozada[a], Carlos Ríos[b], Hans T. Castro[a]*

a. *Programa de Ingeniería Ambiental, Corporación Universitaria del Huila-CORHUILA, Colombia*
b. *Laboratorio de Microscopia Electrónica de Barrido, Universidad Industrial de Santander, Colombia*
** Autor de correspondencia: hans.castro@corhuila.edu.co*

Palabras Claves: Biocápsula; bioeconomía; fertilizantes.

Con el aumento de la población mundial y las altas demandas de la producción de alimentos, los fertilizantes juegan un papel importante en el aumento del rendimiento de los cultivos y la producción de alimentos. Sin embargo, la mayoría de los nutrientes de los fertilizantes no son absorbidos por los cultivos y gran parte de estos se pierden por lixiviación, infiltración y volatilización, generado de esta forma problemas ambientales. Por esta razón, en esta investigación buscamos desde la bioeconomía aprovechar subproductos generados por las agroindustrias y que hoy en día son un problema ambiental y que, además, no son aprovechados. En este estudio se prepararon biocápsulas de mezclas de hidroxiapatita ($Ca_5(PO_4)_3(OH)$), obtenida de las escamas de Tilapia roja (*Oreochromis spp*.) y alginato de sodio (AS) extraído de las algas pardas (*Sargassum spp)* para estudiar la difusión del NH_4Cl, en presencia de agua desionizada y ácido acético glacial (Merck ®). Todos los materiales obtenidos y sus mezclas fueron caracterizadas por espectroscopia de infrarrojo (*Perkin Elmer*) y SEM (FEI QUANTA 650) y el análisis de la difusión de los iones a través de las biocápsulas preparadas (15, 20 y 25 %p/p) se hizo a través de un conductímetro digital marca *Hanna Instruments*. La investigación se llevó a cabo en tres etapas: 1) extracción de los biomateriales HA y AS, 2) caracterización de los biomateriales por SEM y FTIR (**Figuras 1 y 2**), 3) Análisis de la difusión de NH_4Cl con base en las mediciones de conductividad a través del tiempo para dos medios: acuoso y ácido. Los resultados obtenidos de FTIR de los dos biomateriales permitieron identificar los grupos funcionales que hacen parte del material comparado con la literatura y con el SEM de la hidroxiapatita se apreció la asimetría del mineral y el tamaño del poro. Finalmente, el análisis de difusión NH_4Cl en las biocápsulas (15 -25 %p/p) dispersas en agua, presentaron los siguientes valores de 0,325 mg L^{-1} min^{-1}, 0,6724 mgL^{-1} min^{-1}, y 0,5137 mgL^{-1} min^{-1} para las constantes cinéticas iniciales, k_0 (25%p/p), k_0 (20%p/p) y k_0 (15%p/p), respectivamente.



Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Figura 1. Espectros de FTIR. a) hidroxiapatita b) alginato de sodio

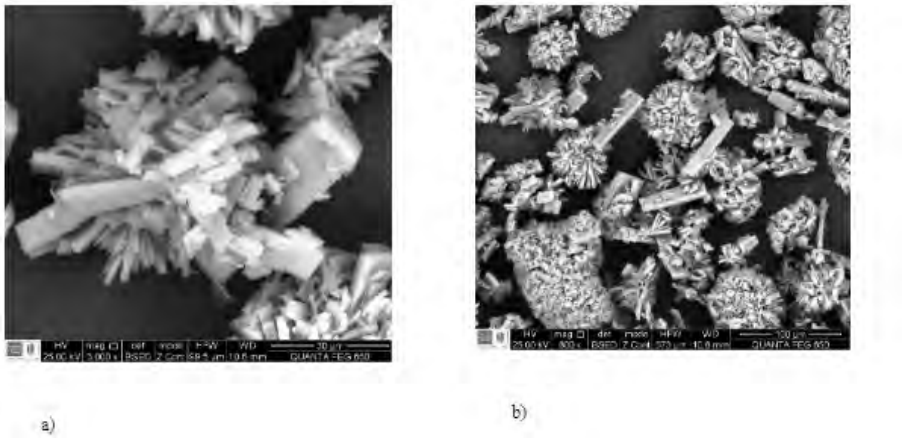


Figura 2. Imagen de Microscopia Electrónica de Barrido (SEM) de la hidroxiapatita. a) 30 □m b) 100 □m.

Referencias bibliográficas.

Sciena, C.R., dos Santos, M.F., Moreira, F.K.V., Sena, A.R., Marconcini, J.M., Correa, D.S., Paris, E. Starch: Pectin Acidic Sachets Development for Hydroxyapatite Nanoparticles Storage to Improve Phosphorus Release. *J Polym Environ* **27**, 794–802 (2019). https://doi.org/10.1007/s10924-019-01391-5

Giroto, A., Guimarães, G., Foschini, M., Ribeiro, C. Role of Slow-Release Nanocomposite Fertilizers on Nitrogen and Phosphate Availability in Soil. *Sci Rep* **7**, 46032 (2017). https://doi.org/10.1038/srep46032

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Efecto de carbonato, sulfato, fosfato y Hierro (II) en la degradación foto-oxidativa de Fluconazol

Nicoll Martínez[a], Evelin Obeso[a], Sandra P. Castro[a]*, Luz Dary Caicedo[b],

[a]Grupo de Investigación en Electroquímica y Medio Ambiente.
[b]Grupo de Investigación Micología.
Facultad de Ciencias Básicas. Universidad Santiago de Cali.
Campus Pampalinda Calle 5 # 62-00. Santiago de Cali. Colombia
** Autor de correspondencia: sandra.castro00@usc.edu.co*

Palabras Claves: Química Ambiental; Tratamiento Ambiental; Fotooxidación; Calidad de Agua; Cinética Química.

El Fluconazol (FCZ) es uno de los fungicidas más utilizados para combatir a fitopatógenos, la baja tasa de degradación lo convierte en un contaminante emergente. Este estudio hace aportes en el seguimiento cinético de la fotooxidación de FCZ mediante espectroscopia UV-vis bajo diferentes condiciones tales como pH, longitud de onda, relación contaminante vs peróxido de hidrógeno (FCZ:H_2O_2) y concentración de iones como hierro (II), sulfato, carbonato y fosfato. Se determinó que la foto-degradación del FCZ, siguió una cinética de pseudo primer orden con constante de velocidad y tiempo de vida medio dependiente del pH, relación FCZ:H_2O_2 y de los aniones y cationes presentes.
De acuerdo con los estados de protonación del FCZ, pKa 2.56 y 2.94, la especie dominante a pH 2,0 y pH 2,5 es la especie FCZ^{2+} y FCZ^{+}, referente a la protonación del átomo de nitrógeno. El anión carbonato y el catión Fe (II) mejoran la degradación del fungicida, seguida de sulfato y fosfato. Con carbonato se obtuvo remoción superior al 99% en 25min con relaciones 1:4 FCZ:H_2O_2. El estudio cromatográfico de los subproductos de la foto-degradación de FCZ identificados por CG-MS, evidencia defluoración oxidativa o mineralización del compuesto. Los resultados obtenidos de este estudio contribuyen a la industria del agua en especial las aguas residuales, presenta estudio de variables que pueden ser aplicadas al utilizarse en reactores planta piloto o industriales.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIII-506-P ***REMOCIÓN DE LOSARTÁN EN AGUAS DE RIEGO REALES DE LA SABANA DE BOGOTÁ MEDIANTE UN SISTEMA DE ELECTROCOAGULACIÓN (AL-AL) COMBINADO CON UN SISTEMA DE OXIDACIÓN AVANZADA, EQUIPADO CON UN ÁNODO DE DIAMANTE DOPADO CON BORO Y GRAFITO.***

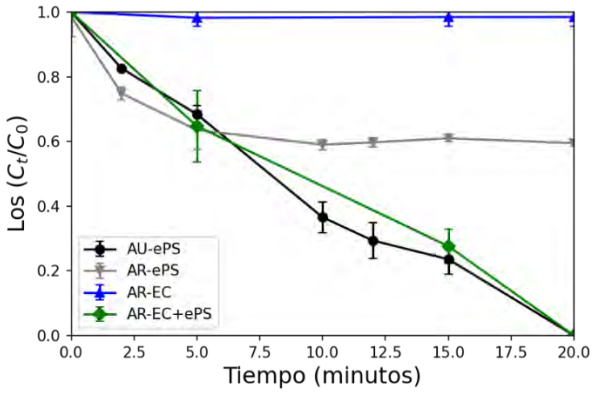
Remoción de Losartán en aguas de riego reales de la sabana de Bogotá mediante un sistema de electrocoagulación (Al-Al) combinado con un Sistema de oxidación avanzada, equipado con un Ánodo de Diamante Dopado con Boro y Grafito.

R.A Echeverry-Gallego [ab], D. Martínez-Pachón [a], A. Moncayo-Lasso [a]*

a. *Grupo de Investigación en Ciencias Biológicas y Quimicas, Universidad Antonio Nariño, Colombia*
b. *Doctorado en Ciencia Aplicada, Universidad Antonio Nariño, Colombia*
** Autor de correspondencia: amoncayo@uan.edu.co*

Palabras Claves: Persulfato, Oxidación avanzada, Contaminantes emergentes, radical sulfato, radical hidroxilo.

En la sabana de Bogotá, el agua de riego proviene de fuentes de agua superficiales, por ejemplo, el Distrito de Riego y Drenaje – La Ramada. El agua de riego de este distrito es tomada del agua lluvia y del Rio Bogotá, en el cual se ha logrado determinar una carga considerable de contaminantes de preocupación emergente (fármacos y microorganismos), los cuales pueden ser potencialmente perjudiciales para la salud humana, la flora y fauna. Para mitigar esta problemática, se han implementado sistemas de oxidación avanzada que han demostrado potencial para eliminar compuestos recalcitrantes en matrices de agua complejas. Dentro de estos procesos destacan los basados en persulfato, el cual puede ser generado al implementar ánodos de diamante al oxidar el sulfato en radical sulfato. En este trabajo, las aguas de riego fueron dopadas con 20 ppm de Losartán, y a continuación fueron tratadas con un sistema de electrocoagulación (Al-Al) modo batch, con una densidad de corriente de 17.14 $mAcm^{-2}$ y 5 minutos de tratamiento. Luego esta agua tratada se transfirió a una celda modo batch equipada con un anodo de diamante dopado con Boro y un catodo de grafito, como electrolito soporte se utilizó Na2SO4 y se opero a una densidad de corriente de 28.40 $mAcm^{-2}$, hasta que el Losartán no fuera detectado por HPLC.



Grafica 1. Efecto de matriz en la remoción de Losartán. Densidad de corriente = 17.14 mA cm^{-2}; Volumen = 0.1 L; electrolito = Na_2SO_4 0.1 M; Losartán = 20 ppm

Los resultados demostraron que el sistema de electrocoagulación por sí solo no es suficiente para la eliminación de Losartán ya que solamente logro reducir en 1% la concentración inicia Sin embargo las condiciones fisicoquímicas del lixiviado

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

mejoraron considerablemente al implementar este sistema, (TOC_0 = 58.96mgC L^{-1}; TOC_f = 38.75mgC L^{-1}). Aunque el sistema de oxidación por si solo logro remover aproximadamente el 40% de la concentración de Losartán tampoco fue suficiente para degradar la totalidad del Losartán de la matriz de agua real, sin embargo, al combinar los procesos de Electrocoagulacion-Oxidacion Avanzada, se logro degradar la totalidad del Losartán en 20 minutos de tratamiento, al igual que el sistema en agua ultrapura dopada con Losartan. Demostrando que los sistemas de oxidación avanzada, podrían requerir pretratramientos como la electrocoagulación para ser implementados en aguas reales o matrices complejas

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA ANALÍTICA

IV-80-P ***DESARROLLO DE UN MATERIAL DE REFERENCIA "IN HOUSE" DE DELTA-9-TETRAHIDROCANNABINOL (THC) CON FINES FORENSES***

Desarrollo de un Material de Referencia "In House" de Delta-9-Tetrahidrocannabinol (THC) con Fines Forenses

William F. Garzón [a]*, Diego A. Ahumada [b], Chiara Carazzone [c], Juan S. Mutis [c],

[a] *Grupo de Investigación en Drogas de Abuso, Fiscalía General de la Nación, Colombia*
[b] *Departamento de Química , Universidad de Bergen, Noruega*
[c] *Laboratorio de Técnicas Analíticas Avanzadas en Productos Naturales, Departamento de Química, Universidad de los Andes, Colombia*

*wigarzon@fiscalia.gov.co

Palabras Claves: material de referencia; in house; THC; estabilidad; homogeneidad

El último informe de Naciones Unidas indica un aumento continuo en el consumo global de drogas, con una estimación de 296 millones de consumidores para el año 2021. Del total de drogas de abuso, el cannabis continúa siendo las más consumida, para 2021 se estimaron 219 millones de consumidores [1]. En Colombia, el cannabis es la droga de abuso más incautada, lo que demanda a los laboratorios forenses contar con altas cantidades de material de referencia certificado (MRC) de Delta-9-Tetrahidrocannabinol (THC), con el cual se puede soportan las mediciones rutinarias, mediante el empleo de cartas de control, entrenamiento de personal, el control del error sistemático, la evaluación de las características de desempeño de los métodos, entre otros usos [2]. Desafortunadamente, la adquisición de MRC de THC es un proceso costoso y prolongado, ya que depende de procesos de importación; por lo anterior se hace necesario iniciar un proceso de producción de un material de referencia "in house" de THC, para optimizar el uso del MRC de THC.

En este contexto, la presente investigación tiene como objetivo presentar los resultados obtenidos en la preparación de un material de referencia de THC. Para el desarrollo del estudio se siguieron los lineamientos y recomendaciones de la ISO 17034 y la guía ISO 35 [3,4].

Para la obtención del candidato a MR, se partió de una muestra de cannabis que fue sometida a extracción con etanol, concentrada y posteriormente se cuantificó el contenido de THC por cromatografía líquida con detector de arreglo de diodos. Posteriormente, el extracto se diluyó hasta una concentración 3 mg/mL de THC, se homogenizó y se envaso en unidades de 1 mL, obteniéndose un lote de 80 unidades, las cuales se almacenaron a – 20°C. Lo estudios de homogeneidad y estabilidad realizados indicaron que el MR producido es lo suficientemente homogéneo y estable para ser empleado en diferentes aplicaciones en la rutina del laboratorio.

[1] UNODC, World Drug Report 2023, Vienna, June 2023. https://www.unodc.org/unodc/data-and-analysis/world-drug-report-2023.html
[2] Instituto Nacional de Metrología, Guía desarrollo de materiales de referencia in-house para el control de calidad de residuos de plaguicidas en alimentos, INM/GTT-O/03, Bogotá, 2023.
[3] ISO, "17034 General requirements for the competence of reference material producers." Geneva, Switzerland, 2016.
[4] ISO. ISO 35:2017, Reference materials — Guidance for the characterization and assessment of homogeneity and stability, Geneva: ISO, 2017.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-86-P CARACTERIZACIÓN SENSORIAL DEL COLD BREW MEDIANTE SPE-P&T-GC-O

Caracterización sensorial del Cold Brew mediante SPE-P&T-GC-O

Juan E. Zapata*, Juan D. Dereix[a], Carlos A. Lopez[a], Julián A. Zapata[a]

[a] *Laboratorio de Análisis de Residuos, Universidad de Antioquia, Colombia*
**Autor de correspondencia: juan.zapata77@udea.edu.co*

Palabras Claves: Cold Brew; Extracción en fase solida; Purga y trampa; Cromatografía de gases; olfatometría.

El café es un producto alimenticio ampliamente comercializado a nivel mundial en diversas presentaciones, incluyendo grano verde, tostado o molido. Los granos contienen altos niveles de cafeína, lo que proporciona sensaciones estimulantes y placenteras a los consumidores. Su aroma es complejo debido a la variedad de compuestos volátiles presentes, que pueden variar según factores como el lugar de cultivo, la variedad del grano, la fermentación, el nivel de tostado y la técnica de preparación. El objetivo de este estudio es evaluar la calidad y el perfil de aroma del Cold Brew, una técnica de preparación que consiste en hacer una bebida fría con un tiempo de extracción más largo, resultando en un perfil de aroma y sabor más dulce, floral y frutal, ya que se reduce la acidez mediante la disminución de los ácidos clorogénicos extraídos.

Para evaluar la calidad del Cold Brew, se utiliza la extracción en fase sólida en su versión de purga y trampa (SPE-P&T), junto con cromatografía de gases acoplada a un puerto de olfación (GC-O). Para verificar la extracción de aroma, se realizaron experimentos a 37°C, ajustando parámetros como el tiempo de extracción, el flujo de gas de purga y la relación de solventes de elusión (diclorometano/metanol). Donde 4 horas, 100 mL/min y 95/5, respectivamente fueron las condiciones optimas para obtener un extracto representativo.

La identificación del perfil de aroma del Cold Brew se llevó a cabo mediante el entrenamiento continuo de un grupo de 5 panelistas, quienes evaluaron la calidad del aroma del extracto representativo utilizando una escala de 1 a 3. Durante el análisis olfatométrico se encontraron notas de dulce, caramelo, vainilla, chocolate, maní, verdura, tostado, amaderado, amareto y citrico. Sin embargo, también se identificaron algunos olores no deseados, como húmedo, cigarrillo, ceniza, tierra, quemado y plástico.

En conclusión, esta metodología de extracción proporciona una comprensión sólida del perfil de aroma del Cold Brew, permitiendo determinar su calidad y características distintivas.

En el futuro, se espera realizar un análisis mediante espectrometría de masas en combinación con GC-O, lo que permitirá una identificación más precisa y detallada de los compuestos químicos responsables del aroma.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-87-P ***DETERMINACIÓN DE SELECTIVIDAD DE RESINAS DE INTERCAMBIO IÓNICO PARA DETERMINACIÓN DE CONTAMINANTES EN AGUA LLUVIA.***

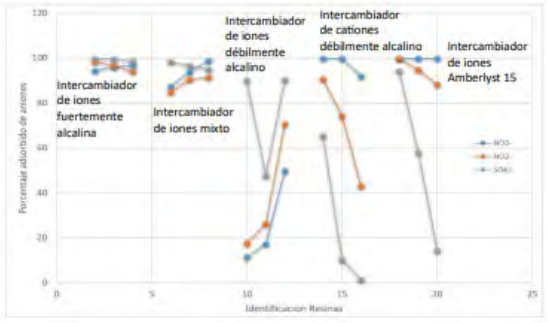
Determinación de Selectividad de Resinas de Intercambio iónico para determinación de contaminantes en Agua Lluvia.

Feyer Mamian[a], Deibison A Perafan[b], Ayda M Erazo[c], *Fernando J Hernández[d].

[a]*Quimica de compuestos bioactivos, Universidad del Cauca, Colombia.*
*José Fernando Hernández Blanco. fjhernandez@unicauca.edu.co

Palabras claves: selectividad; resinas; intercambiador; eficiencia.

El propósito de este trabajo es estudiar la capacidad de absorción de diferentes resinas de intercambio iónico catiónicas aniónicas y mixtas en el estudio de contaminantes ambientales en agua lluvia empleando la espectroscopia de UV-Vis en la cuantificación (NO_3^- 270nm, NO_2^- 540nm, y SO_4^{-2} 450nm,) Para el desarrollo del estudio se inicio con el diseño de captadores pasivos de agua lluvia con el apoyo del grupo de aerosoles atmosféricos de la UNAM, donde se adicionaron 30 g de cada resina, a continuación, se determinó el volumen muerto de cada captador y se adicionaron diferentes volúmenes de una solución que contenía nitratos y nitritos a 250 ppm y sulfatos a 500 ppm teniendo en cuenta las concentraciones máximas permitidas. En la gráfica 1, se exponen los resultados obtenidos, donde las resinas muestran un comportamiento único y selectivo hacia los diferentes analitos. Para la retención de sulfatos, el intercambiador de iones fuertemente alcalino mostró el mejor rendimiento presumiblemente debido a sus grupos hidroxilo (OH-) que permiten un intercambio eficiente con los iones (SO4-2). En cuanto a la retención de nitratos, el intercambiador Amberlyst 15, demostró la mayor eficiencia, lo que se atribuye a la presencia de grupos amino cuaternarios que facilitan el intercambio con los iones (NO_3^-), el intercambiador mixto superó a las otras resinas en la retención de nitritos. Aunque se esperaría que el Amberlyst 15, con sus grupos amino cuaternarios, fuera el más eficiente en esta tarea, los resultados indican que el tamaño de poro, capacidad de intercambio iónico y otras características de la estructura del intercambiador mixto favorecen la retención de nitritos en este caso. En conclusión, cada resina presenta ventajas y selectividad específica hacia ciertos analitos, por lo que se recomienda considerar las características de la muestra y los objetivos del análisis al seleccionar la resina apropiada. Estos hallazgos proporcionan información valiosa para establecer su empleo en la siguiente etapa del monitoreo de contaminantes en agua lluvia, como un nuevo método del análisis de contaminación atmosférica.



Grafica 1. Capacidad de absorción de sulfatos, nitratos y nitritos de los diferentes intercambiadores catiónicos aniónicos y mixtos.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-88-P ***DETERMINACIÓN DE OCRATOXINA A (OTA) EN CACAO (THEOBROMA CACAO L.) Y CAFÉ (COFFEA ARABICA) POR MEDIO DE CROMATOGRAFÍA LÍQUIDA DE ALTA EFICIENCIA (HPLC)***

Determinación de ocratoxina A (OTA) en cacao (*Theobroma cacao L.)* y café *(Coffea arabica)* por medio de cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC)

Erika P. Moreno* [1], **Mery C. Pazos** [1], **Sandra P. Chaparro** [2]

[1] *Desarrollo y Aplicación de Nuevos Materiales, Escuela de Ciencias Químicas, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Colombia*

[2] *Grupo de Catálisis de la UPTC, Escuela de Ciencias Químicas, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Colombia*

** Autor de correspondencia: erika.moreno07@uptc.edu.co*

Palabras Claves: Columna de inmunoafinidad, fluorescencia, hongo, ocratoxina A.

La Ocratoxina A (OTA) corresponde a una micotoxina que es producida por hongos del género *Aspergillus* y *Penicillium*, y en la actualidad, constituyen uno de los peligros sanitarios que pueden afectar diferentes productos agrícolas alrededor de todo el mundo, como el cacao, el café, cereales, las uvas, el vino, entre otros [1]. Debido a sus efectos nocivos para el ser humano y para los animales, algunos países han establecido unos límites máximos de concentración que puede tener cada producto alimentario. Por lo tanto, su detección es un parámetro importante para el control de calidad de alimentos [2]. Particularmente, se tiene interés en verificar el método de detección en los productos de cacao y café, debido a representan un sector económico importante para Colombia a nivel de exportaciones, así para el año 2022, se reportan 11.689 toneladas de cacao, mientras que, para el mismo año, se exportaron 11,1 millones de sacos de 60 Kg de café [3-4].

Por lo anterior, se considera necesario desarrollar una metodología confiable para la determinación de Ocratoxina A (OTA) en matrices complejas como el cacao y el café por medio de la cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC) acoplado a un detector de fluorescencia (FLD), el cual ofrece niveles de detección hasta de 0,5 □g/Kg [5]. Para la implementación de esta metodología, se seguirá el procedimiento establecido en la norma AOAC # 2000.03 en donde se establece el uso columnas de inmunoafinidad para la purificación de la OTA [6].

Durante el desarrollo del proyecto se pretende lograr la optimización del método de cuantificación correspondiente para el análisis de OTA en las muestras mencionadas que se cultivan en la Región de Boyacá. Para ello se evaluarán las características de desempeño tales como linealidad, exactitud, precisión, límite de detección y límite de cuantificación. Adicionalmente se analizará las variables que afectan el porcentaje de recuperación de las columnas de inmunoafinidad, para lo cual se prepararán adicionados usando un patrón interno de OTA en las muestras seleccionadas, para disminuir el efecto matriz [5].

Referencias

[1] M. Bryła *et al. Poult Sci*, vol. 102, no. 2, p. 102413, Feb. 2023, doi: 10.1016/J.PSJ.2022.102413.

[2] R. A. Miguel Alfonso *et al. Mutation Research/Genetic Toxicology and Environmental Mutagenesis*, vol. 878, p. 503482, Jun. 2022, doi: 10.1016/J.MRGENTOX.2022.503482.

[3] Fedecacao "Economía Nacional | Sitefedecacao." https://www.fedecacao.com.co/economianacional (accessed Apr. 03, 2023).

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

[4] Federación Nacional de Cafeteros "Producción anual de café de Colombia cierra 2022 en 11,1 millones de sacos - Federación Nacional de Cafeteros." https://federaciondecafeteros.org/wp/listado-noticias/produccion-anual-de-cafe-de-colombia-cierra-2022-en-111-millones-de-sacos/ (accessed Apr. 03, 2023).
[5] Miraglia M Brera C 2002. Publisher: SCOOP Directorate-General Health and Consumer Proteccion, http://europa.ev.int/comm/food/fs/scoop/3.2.7_en.pdf
[6] "AOAC 2000.03-2000, Ochratoxin A in barley. Immunoaffinity column - $14.45 : AOAC Official Method."http://www.aoacofficialmethod.org/index.php?main_page=product_info&cPath=1&products_id=727 (accessed Jul, 21 2023).

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-89-P ***VERIFICACIÓN DEL MÉTODO ANALÍTICO PARA LA DETERMINACIÓN DE MERCURIO TOTAL EN CARBONES Y CENIZAS DE CARBÓN POR COMBUSTIÓN DIRECTA***

Verificación del Método Analítico para la Determinación de Mercurio Total en Carbones y Cenizas de Carbón por Combustión Directa

Merydoreya Moreno[a]*, Fredy A. Rodríguez[a], Yuly A. Pinto[a], Jhonantan S. González[a], John E. Medina[a]

[a] *Dirección de Laboratorios, Servicio Geológico Colombiano, Colombia*
*mdmoreno@sgc.gov.co

Palabras claves: Mercurio, verificación de métodos, estimación de incertidumbre, espectrofotometría de absorción atómica.

Las emisiones antropogénicas de mercurio son una preocupación importante a nivel mundial debido a sus efectos perjudiciales para la salud humana y el medio ambiente. En la "*Evaluación Mundial de Mercurio 2018*" realizada por el Programa de las Naciones Unidas para el Medio Ambiente, se concluye que la actividad humana ha incrementado las concentraciones atmosféricas totales de mercurio en torno a un 450% respecto del nivel natural; los focos fijos de combustibles fósiles y biomasa generan aproximadamente el 24% de la emisiones mundiales estimadas, principalmente debido a la combustión de carbón (21%). La determinación del contenido de mercurio en el carbón es esencial para entender el potencial de emisiones de mercurio durante su combustión.

Teniendo en cuenta la relevancia del contenido de mercurio en carbones es indispensable emplear metodologías analíticas para su cuantificación que permitan obtener resultados analíticos confiables. Para lograr este objetivo no es suficiente con solamente aplicar un método normalizado como la ASTM D6722-19, también es necesario verificar que dicho método, implementado bajo las condiciones analíticas del laboratorio, cumple con el fin previsto.

Este trabajo presenta la metodología de verificación y estimación de la incertidumbre de la determinación de mercurio total en carbones y cenizas de carbón por combustión directa bajo el método estándar ASTM D6722-19. La cuantificación de mercurio se realizó por espectrofotometría de absorción atómica, empleando un analizador directo de mercurio Milestone DMA-80. Se emplearon herramientas estadísticas disponibles en R-Studio para evaluar los parámetros de verificación contemplados. Se obtuvo un límite de detección de 0,3 µg Hg/kg B.S., un límite de cuantificación de 18 µg Hg/kg B.S. y un intervalo de medición de 18 µg Hg/kg B.S. a 586 µg Hg/kg B.S. Adicionalmente, se evaluó la exactitud en términos de sesgo, repetibilidad y precisión intermedia, obteniendo resultados dentro de los criterios de aceptación establecidos. Para finalizar, se realizó la estimación de incertidumbre para cada celda de medición, contemplando las fuentes de incertidumbre críticas para la cuantificación de mercurio.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-90-P ***IDENTIFICACIÓN DE LOS COMPUESTOS SENSORIALMENTE ACTIVOS EN EL AROMA DEL COLD BREW POR MEDIO DE HS-SPME-GC-O-MS***

Identificación de los Compuestos Sensorialmente Activos en el Aroma del Cold Brew por Medio De HS-SPME-GC-O-MS

Juan E. Narváez*, Carlos A. Lopez [b], Juan D. Dereix[c], Julián Zapata[d]

[a] *Laboratorio de Análisis de Residuos, Universidad de Antioquia, Colombia*

** Autor de correspondencia: esteban.narvaez@udea.edu.co*

Palabras Claves: Microextracción en fase sólida; café; cold brew; cromatografía de gases

El café es una de las bebidas más consumidas en el mundo. Su consumo es un componente importante de la vida social, y ha llevado a la búsqueda de nuevas formas de consumo que generen experiencias diferentes. Entre estas variaciones, el Cold Brew (CB) se ha destacado como una metodología de extracción en frío que ha ganado popularidad en los últimos años debido a su sabor más fresco que los cafés tradicionales preparados en caliente. Sin embargo, a pesar de su popularidad, el CB carece de parámetros de preparación y estándares de calidad que definan su perfil sensorial. Por lo tanto, es de suma importancia desarrollar métodos para identificar los compuestos sensorialmente activos presentes en el CB.

El estudio tiene como objetivo el desarrollo de un método de identificación de los compuestos sensorialmente activos en el aroma del CB mediante un diseño de experimentos de la técnica de Microextracción en Fase Sólida (HS-SPME) para su posterior análisis en un cromatógrafo de gases con detectores tipo espectrómetros de masas y puertos de olfacción (GC-O-MS).

Tras determinar los parámetros óptimos de la HS-SPME, incluyendo 50 minutos de extracción, 5 minutos de acondicionamiento, 6 mL de volumen de muestra, el uso de una fibra triple (DVB/PDMS/CAR) y una temperatura constante de 37°C, se obtuvo el perfil aromático que permitió identificar 36 de los 40 picos con actividad sensorial utilizando un cromatógrafo Thermo Scientific Trace 1300 acoplado a un espectrómetro de masas de tipo TWQ Duo Mass Spectrometer, operado por un TriPlus RSH Autosampler encargado de realizar la HS-SPME.

Los resultados del análisis revelaron la presencia de compuestos presentes tanto en bebidas tradicionales de café como en otros menos comunes o en concentraciones bajas, con notas frutales, dulces y fenólicas. Se identificaron aproximadamente 6 aldehídos, 5 cetonas, 7 pirazinas, 9 furanos y otros compuestos. Estos hallazgos respaldan la información previa en la literatura, destacando al CB por sus notas aromáticas similares. La identificación de estos compuestos sensorialmente activos en el CB establece una base sólida para una mejor comprensión de su perfil aromático y contribuye al avance del conocimiento en este campo.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-91-P USO DE INMUNOENSAYOS DE FLUJO LATERAL PARA LA DETERMINACIÓN DE PLAGUICIDAS EN SISTEMAS ACUÁTICOS CONTINENTALES

Inmunoensayos de Flujo Lateral para la Determinación de Plaguicidas en Sistemas Acuáticos Continentales

Yulieth D. Banguera Ordoñez [a, c]*, Johanna Fernández[c], Sergi Morais[a,b], Ángel Maquieira[a,b]

[a]Instituto Interuniversitario de Investigación de Reconocimiento Molecular y Desarrollo Tecnológico, Universitat Politécnica de Valéncia-Universitat de Valéncia, Camino de vera s/n, 46022, Valencia, España
[b]Departamento de Química, Universitat Politécnica de València, Camino de Vera s/n, 46022, Valencia, España.
[c] Centro de la Construcción, Servicio Nacional de Aprendizaje, Colombia.
* *Autor de correspondencia:* e-mail: ybanguera@gmail.com

Palabras Claves: Biosensores; Flujo lateral; Inmunocaptura; Plaguicidas

Los plaguicidas son sustancias que plantean una preocupación importante sobre los sistemas acuáticos continentales, ya que pueden perturbar, dañar o incluso extinguir diversas formas de vida [1]. Además, se prevé que el cambio climático influya en la dinámica de permanencia de estos en el medio ambiente [2]. La monitorización de los residuos de estas sustancias en sistemas acuáticos continentales plantea grandes retos debido a que actualmente se emplean herramientas de análisis costosas de respuesta lenta y requiere de personal cualificado. Lo anterior hace preciso que se disponga de métodos de análisis más rápidos y económicos que permitan realizar medidas en tiempo real, con el fin de disminuir los efectos negativos que los residuos de plaguicidas tienen sobre el ser humano y el medio ambiente. Para abordar esta problemática proponemos el uso de inmunoensayos de flujo lateral competitivos (Figura 1a.). Estos ensayos son una alternativa útil que permite obtener información de calidad y rápida para que la toma de decisiones sea más efectiva.

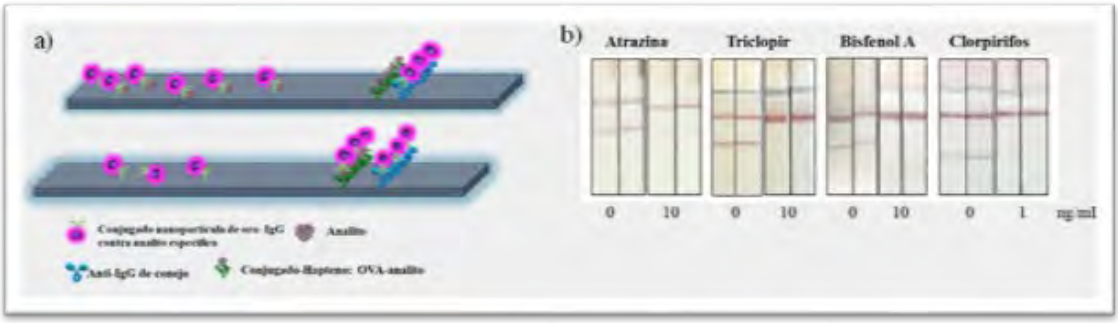


Figura 1. a) inmunoensayo competitivo para determinación de plaguicidas. b) límite de detección visual para cada analito.

Los resultados obtenidos han mostrado que los inmunoensayos desarrollados en formato de tira reactiva muestran una buena sensibilidad en relación a las concentraciones encontradas de estos compuestos en el medio ambiente. El rango de trabajo está comprendido entre 10-400 ng/L; 0.25-105 ng/L; 12-3 10^3 ng/L y 5-26 10^3 ng/L, para clorpirifos, atrazina, triclopir y Bisfenol A, respectivamente. El límite de detección visual alcanzado fue 10 ng/L para Bisfenol A, atrazina, triclopir y de 1.0 ng/mL para clorpirifos (Figura 1b). Su elevada sensibilidad y tiempo de respuesta rápida (10 min) hacen de esta

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

metodología una herramienta analítica muy adecuada para el control de los niveles de estas sustancias en sistemas acuáticos continentales. Nuestro objetivo final es integrar los cuatro ensayos en una única tira reactiva, sustituyendo las líneas por puntos (matriz de puntos), lo que permitirá realizar la determinación simultánea de los cuatro plaguicidas en muestras de agua [3].

Bibliografía

[1] Garnier, A. *et al*. Talanta, ***2020***, 21, 121316
[2] Martínez, M. *et al*. Science of The Total Environment, ***2023***, 878, 163018
[3] Sena-Torralba, A. *et al.* Biosensors ***2022***, 12, 980.

Agradecimientos

Yulieth D. Banguera agradece la financiación al Ministerio de Ciencia Tecnología e Innovación de Colombia (convocatoria No. 8852).

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-92-P ***DESARROLLO DE UN MÉTODO DE CROMATOGRAFÍA LÍQUIDA DE ALTA EFICIENCIA PARA LA SEPARACIÓN Y CUANTIFICACIÓN DE DIOSGENINA EN UN EXTRACTO DEL FRUTO IGUARAYA DE LA PLANTA CARDÓN GUAJIRO (STENOCEREUS GRISEUS)***

Desarrollo de un Método de Cromatografía Líquida de Alta Eficiencia para la Separación y Cuantificación de Diosgenina en un Extracto del Fruto Iguaraya de la Planta Cardón Guajiro (*Stenocereus griseus*)

Emerson, E León[a]

[a] *Grupo de investigación en química aplicada INQA, Universidad El Bosque, Colombia*
[a]Emerson, E León: leonemerson@unbosque.edu.co

Palabras claves: Cromatografía líquida; diosgenina; iguaraya; validación.

Resumen

La comunidad indígena Wayuú (La Guajira, Colombia), ha tratado enfermedades con recursos naturales de su entorno. Uno de los recursos más utilizados por esta comunidad para el tratamiento de enfermedades de tipo gastrointestinal, son las infusiones de la iguaraya, un fruto de la planta cardón guajiro. Teniendo en cuenta que un buen número de saponinas poseen propiedades antiinflamatorias, el presente trabajo estudia la diosgenina, una saponina que puede estar presente en un extracto metanólico de la pulpa del fruto, desarrollando un método de separación y cuantificación del analito por medio de cromatografía líquida de alta resolución con un detector UV-VIS, realizando una validación del procedimiento de extracción para garantizar la exactitud, precisión, linealidad, selectividad, reproducibilidad y robustez de los resultados.

Después de realizar múltiples ensayos y buscando la mejor resolución del pico de diosgenina, separado de los demás picos correspondientes a los componentes de los extractos obtenidos, se encontró que las condiciones que permiten una separación y cuantificación son flujo de 1 mL/min, fase móvil 90:10 ACN:Agua, Columna Ultra AQ C18, a 194 nm y una temperatura de 35ºC.

En el cromatograma de la figura 1, se puede apreciar el pico característico en un tiempo de retención (t_R) 7,168 minutos, el cual es el mismo tiempo de retención obtenido para el estándar de diosgenina ($\approx t_R$ = 7,206 min), posterior se realizó adición de patrón al extracto y se evidenció un incremento en la intensidad del pico en ese mismo tiempo de retención, lo que posiblemente permite considerar que se está encontrando una señal característica de la diosgenina. Para este estudio se trabajó con el método de estándar externo y el área bajo la curva del pico obtenido fue de 2´642.171. Determinando por medio de una curva de calibración, que la concentración de diosgenina (saponina) presente en el extracto metanólico del fruto iguaraya, fue de 36,3627 ppm ± 0,0007 ppm.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

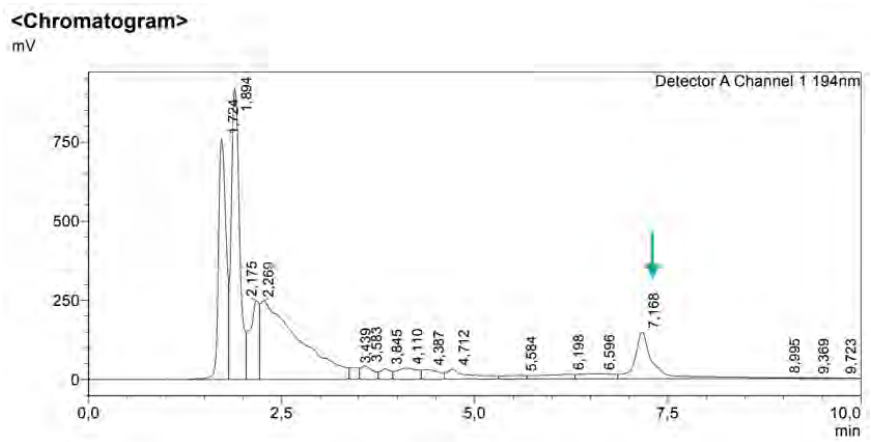


Fig. 1: Cromatograma obtenido del extracto de iguaraya bajo condiciones del método desarrollado a 194 nm.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-93-P ***MODIFICACIÓN DE UNA SUPERFICIE POLIMÉRICA CON RESORCINARENOS PARA LA PRECONCENTRACIÓN DE CARNITINA***

Modificación de una Superficie Polimérica con Resorcinarenos para la Preconcentración de L-Carnitina

Gabriel A Ramírez*, Mauricio Maldonado

[a] *Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá*
[b] *Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá*

** Autor de correspondencia: gramirezpe@unal.edu.co*

Palabras Claves: Resorcinarenos; sistemas huésped-hospedero; interacciones moleculares; L-carnitina.

Este trabajo de investigación tiene como objetivo la síntesis y caracterización de resorcinarenos tipo *corona* para modificar una superficie polimérica con base en metacrilatos y evaluar la interacción molecular y su capacidad de preconcentración con L-carnitina.

La investigación se realizó en cinco etapas: En la primera etapa se desarrolló la síntesis de los resorcinarenos de partida entre el resorcinol y propanal y/o heptanal, obteniendo como resultado los productos ***C***-tetra(etil)calix[4]resorcinareno (**1ª**) y ***C***-tetra(hexil)calix[4]resorcinareno (**1B**), los cuales fueron caracterizados por diferentes técnicas instrumentales tales como IR-ATR, RMN-1H, RMN-13C y espectrometría de masas obteniendo como un único confórmero el tipo *corona* de gran utilidad por su facilidad de formar sistemas tipo host-guest.

En la segunda etapa se evaluó la interacción host-guest (huésped-hospedero) en solución entre los resorcinarenos ***C***-tetra(etil)calix[4]resorcinareno (**1ª**) y ***C***-tetra(hexil) calix[4]resorcinareno (**1B**) con L-carnitina (**1C**),este se realizó en disolucion acuosa donde se evaluó mediante RMN-1H y espectrometría de masas evidenciando una interacción entre ellos debido a la cavidad existente entre los resorcinarenos gracias a sus interacciones tipo π.

La tercera etapa consistió en la copolimerización entre el butilmetacrilato (BMA) y etilendimetacrilato (EDMA) y su modificación física con los resorcinarenos (**1A** y **1B**) el material polímero se caracterizó a través de IR y SEM.

En la cuarta etapa se evalúaron las variables de tiempo, solvente, volumen de carga, concentración y pH. Elegidas las mejores condiciones estas se aplican en la quinta y última etapa para la cuantificación de la L-carnitina (**1C**) partiendo del material polímero modificado con resorcinarenos (**1A** y **1B**) mediante cromatografía líquida acoplada a masas.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-224-P EXTRACCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE ÁCIDOS GRASOS LIBRES DE LODOS DE DESECHOS DE LA INDUSTRIA DE ACEITE DE PALMA Y SU POSTERIOR MODIFICACIÓN Y EVALUACIÓN COMO UN TENSOACTIVO

Extracción y Caracterización de Ácidos Grasos Libres de Lodos de Desechos de la Industria de Aceite de Palma y su Posterior Modificación y Evaluación como un Tensoactivo

Paulinn S Ferrer [a*], **Juan-Manuel Urbina** [a], **Javier Chaparro**

[a] *Laboratorio de Química Orgánica y Biomolecular (LQOBio), Universidad Industrial de Santander, Colombia*
* *Paulinn-Scolly Ferrer:* Paulinn.ferrer@correo.uis.edu.co

Palabras Claves: Lodos residuales de aceite de palma; Ácidos grasos libres; Esterificación; Tensoactivo.

Colombia es el cuarto productor de aceite de palma a nivel mundial y también uno de los mayores generadores de residuos derivados de esta industria. Entre estos desechos, se encuentran los lodos del aceite de palma (Palm Oil Sludge, POS), depositados para su tratamiento en complejos lagunares (lagunas facultativas y de oxidación). Dado el alto contenido de ácidos grasos libres (Free Fatty Acids, FFA) que presenta el POS, se emplean como materia prima para múltiples propósitos. El presente estudio demuestra que el POS proveniente de la tercera laguna de oxidación del tratamiento de efluentes de la empresa *Palmas del Cesar S.A.* contiene principalmente FFA y no ésteres de glicéridos. Además, la mezcla de los FFA se transformó en sus correspondientes ésteres, que se podrían formularse como un agente tensoactivo.

La separación de los FFA del POS se hizo por extracción Soxhlet utilizando éter de petróleo (EP). Se encontró que más del 80 % en masa del POS corresponde a FFA; por espectroscopía FT-IR se evidenciaron bandas características de tensión y flexión para los grupos -OH y C=O de los ácidos carboxílicos, y la ausencia de las bandas de ésteres de glicéridos (C-O-C). Posteriormente, una esterificación de Fischer con metanol (H_2SO_4 como catalizador) produjo los correspondientes metil ésteres (Fatty Acids Methyl Esters, FAME). Los FAME se separaron de la matriz acuosa (después del tratamiento básico con solución saturada de Na_2CO_3) por extracción continua líquido-líquido utilizando acetato de etilo (AcOEt). La masa extraída se purificó por cromatografía de columna (CC), gel de sílice 60, 70-230 mesh, Merck. La fracción con Rf = 0.33 (EP:AcOEt, 90:1) se caracterizó por GC-MS, mostrando que durante la extracción ocurrió una reacción de transesterificación, obteniendo los correspondientes etil ésteres (Fatty Acids Ethyl Esters, FAEE). Finalmente, los FAEE se probaron como tensoactivos preparando emulsiones de aceite en agua (oil in water, O/W) en relaciones 98:1:1, 18:1:1, 8:1:1 y 3:1:1 de agua : aceite de pino : FAEE y se observó la morfología de cada emulsión mediante microscopía óptica, donde se encontró que las dos emulsiones de mayor concentración de FAEE se mantuvieron estables por más de 60 días.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-227-P ***DETERMINACIÓN DE AZUFRE MEDIANTE CALIBRACIÓN NO CONVENCIONAL "MULTI-ENERGY" EN MUESTRAS DE ORIGEN FOLIAR POR FORMACIÓN DE LA MOLÉCULA DIATÓMICA SN-S HACIENDO USO DE LA TÉCNICA DE ESPECTROSCOPÍA DE ABSORCIÓN ATÓMICA DE FUENTE CONTINUA Y ALTA RESOLUCIÓN (HR-CS-AAS)***

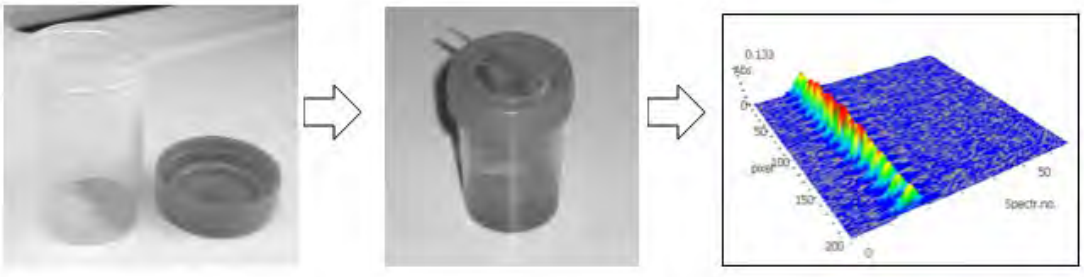
Determinación de azufre mediante calibración no convencional "multi-energy" en muestras de origen foliar por formación de la molécula diatómica Sn-S haciendo uso de la técnica de espectroscopía de absorción atómica de fuente continua y alta resolución (HR-CS-AAS)

Julian D. Quijano [a], **Daniel E. Bustos** [a], **Ricardo E. Rivas***

[a] *Grupo de espectrometría analítica aplicada, Universidad de los Andes, Colombia*
** Autor de correspondencia: re.rivas@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: Absorción atómica con fuente continua de alta resolución (HR-CS-AAS), Calentamiento electrotérmico (ET), Molécula diatómica de Sn-S, Multienergy Calibration (MEC), Modificador químico de matriz

Debido a la reducción de las emisiones de gases de efecto invernadero, el aumento en la demanda de alimentos a nivel mundial y la intensificación de los sistemas de cultivo, se ha visto reducida la recaptación de S en las plantas. Estos hechos han provocado que disminuyan los factores de crecimiento y desarrollo de las mismas, dada la importancia que el S tiene en sus diferentes rutas metabólicas. En vista de la importancia de monitorear en plantas el contenido de S, se planteó la determinación de este elemento en matrices de origen foliar. Ya que las líneas atómicas de S son inviables de detectar en los equipos convencionales de absorción atómica, se planteó la medición del elemento de manera indirecta sobre las líneas de rotación y vibración de la molécula diatómica Sn-S. Para lograr observar dichas líneas es primordial el uso de la técnica de fuente continua de alta resolución (HR-CS-AAS), que aunado a la modalidad de calentamiento electrotérmico (HR-CS-ETAAS) simplifica la preparación de la muestra al prescindir del proceso de digestión, ya que la introducción de la muestra en el sistema de atomización pudo llevarse a cabo en forma de suspensión sólida. Los parámetros correspondientes al programa de calentamiento del horno, como las temperaturas y tiempos de las etapas de calcinación y atomización respectivamente fueron optimizados para obtener la mejor sensibilidad. De igual manera se evaluó el uso de un potencial modificador químico, al igual que la concentración de estaño como precursor de la señal. Adicionalmente, se llevó a cabo la cuantificación mediante una estrategia de calibración no convencional, conocida como calibración "multi-energy" (MEC), con la cual se obtuvieron resultados satisfactorios y concordantes de la respectiva concentración de S contenida en un material de referencia de origen foliar de hojas de tomate (NIST SRM 1573a).



Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-237-P ***DISEÑO EXPERIMENTAL PLACKETT-BURMAN: OPTIMIZACIÓN DEL PRETRATAMIENTO DE CÁNNABIS PARA LA CUANTIFICACIÓN DE METALES POR ICP-MASAS***

Diseño Experimental Plackett-Burman: Optimización del pretratamiento de cánnabis para la cuantificación de metales por ICP-Masas

Daniel E Arias Ramirez[*b,c], **Juan S Mutis**[a,c], **Chiara Carazzone**[a,b,c]

[a] *Laboratorio de Técnicas Analíticas Avanzadas en Productos Naturales (LATNAP), Departamento de Química-Universidad de los Andes, Cra 1 Nº 18A – 12, Bogotá, 111711, Colombia*

[b] *Laboratorio de Espectrometría ICP-Ms, Vicedecanatura de Investigación-Universidad de los Andes, Cra 1 Nº 18A – 12, Bogotá, 111711, Colombia*

[c] *Laboratorio de Investifacion e inovacion en la industria del Cannabis en Colombia (CannaLab), Departamento de Química-Universidad de los Andes, Cra 1 Nº 18A – 12, Bogotá, 111711, Colombia*

* de.arias@uniandes.edu.co

Palabras claves: Digestión de muestras, ICP-Masas, Optimización, Cannabis, Metales pesados.

A pesar de las controversias, las políticas encaminadas a la legalización del cannabis están experimentando un progresivo aumento en su alcance, ampliando cada vez el potencial de esta planta en el ámbito económico. Por lo tanto, es imprescindible desarrollar métodos analíticos que posibiliten la cuantificación de parámetros químicos que permitan establecer su calidad según los criterios establecidos por ley. Como es el caso de los metales pesados, específicamente: el arsénico, cadmio, mercurio y plomo. Estos elementos se pueden cuantificar con gran precisión y sensibilidad mediante técnicas avanzadas como la espectrometría de masas acoplada a plasma por inducción (ICP-Ms), permitiendo determinar la presencia o ausencia de estos y garantizando que no se generen perjuicios a la salud en lo que corresponde a los metales pesados. Por la alta sensibilidad inherente a la técnica ICP-Ms, se requieren precauciones adicionales en la etapa de pretratamiento de la muestra. Este enfoque garantizará que el proceso de digestión exhiba la capacidad de lograr la disolución completa de la muestra, sin menoscabar los analitos de interés ni comprometer la integridad de la misma mediante la introducción de contaminantes.

En el presente estudio, se llevó a cabo un diseño experimental tipo Plackett-Burman en el cual se identificaron 7 variables. Estas variables se seleccionaron por su potencial impacto en los resultados finales de la cuantificación. Además, utilizando un material certificado de la NIST, se determinaron los parámetros óptimos con relación al método de cuantificación en el ICP-MS. Así mismo, se estableció un valor máximo y mínimo basado en lo reportado en la literatura para cada una de las variables asociadas a la digestión, lo que condujo a un total de 12 experimentos. Así, se obtuvieron los valores óptimos de digestión que cumplen con los parámetros analíticos de cuantificación, garantizando la confiabilidad y precisión de los resultados obtenidos.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Producción de un Material de Referencia de Aniones y Cationes Disponibles en Suelos

Johanna P. Abella [a*], **Diego A. Ahumada** [b], **María J. Martínez** [c]

[a] *Grupo de Investigación en Metrología Química y Bioanálisis. Instituto Nacional de Metrología, Colombia.*
[b] *Grupo de Investigación de Residuos de Plaguicidas y destino ambiental en sistemas agrícolas.*
** Autor de correspondencia: jpabellag@unal.edu.co*

Palabras Claves: Caracterización de materiales de referencia; determinación de elementos disponibles en suelos, evaluación de homogeneidad y estabilidad a corto plazo.

La determinación de elementos disponibles en suelos presenta varios retos analíticos asociados a la dependencia de los métodos empleados; generando una limitante en el aseguramiento de la validez y la comparabilidad de los resultados de los laboratorios. Así, se necesitan herramientas metrológicas que ayuden a mitigar esta limitante, por lo que en este trabajo se desarrollaron dos materiales de referencia (MR) para medir hierro, cobre, sulfatos, cloruros (MR1) y fósforo disponible en suelos (MR2). Los MR fueron preparados a partir de dos muestras de suelo adquiridas comercialmente, las cuales se sometieron a estabilización de las especies disponibles mediante lavados del suelo, posteriormente fueron secados a 50 □C durante 48 horas. Una vez seco, el suelo fue molido y tamizado, recolectando menor a 200 □m.

La evaluación de homogeneidad de MR1 fue realizada por ICP-MS para Fe y Cu usando el método de extracción con DTPA-$CaCl_2$ basado en la NTC 5526:2007, mientras que la medición de Cloruros y Sulfatos se realizó por cromatografía iónica usando el método de extracción de agua 1:2 basado en la NTC 5402:2006. Para MR2, la homogeneidad de fósforo disponible fue evaluada por espectrofotometría usando el extractante Bray II. Por otro lado, la estabilidad se evaluó mediante un diseño isócrono durante cuatro semanas. Para este estudio, la temperatura de referencia fue -20 □C, y las condiciones de estudio fueron i) 4.5 □C □ 0.9 □C y ii) 20.5 □C □ 1.8 □C, con humedad relativa de 72.2 % □ 7.7 %. La evaluación de homogeneidad para MR1 y MR2 muestra que poseen niveles adecuados de homogeneidad al obtenerse incertidumbres entre 1.14 % y 5.28 %, que resultan menores a la incertidumbre objetivo establecida en el estudio (9.57 %), mientras que en el estudio de estabilidad se demostró que los materiales son estables a condiciones de temperatura de 4.5 □C □ 0.9 □C. De esta manera, se tiene que los MR desarrollados son homogéneos y estables, cumpliendo con los requisitos para su uso previsto, considerado como ítem de estudio colaborativo.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Evaluación de Equivalencias entre Técnicas Analíticas para la Medición de Aniones y Cationes Disponibles en Suelos

Johanna P. Abella [a*], **Diego A. Ahumada** [b], **María J. Martínez** [c]

[a] *Grupo de Investigación en Metrología Química y Bionálisis. Instituto Nacional de Metrología, Colombia.*
[b] *Grupo de Investigación de Residuos de Plaguicidas y destino ambiental en sistemas agrícolas.*
** Autor de correspondencia: jpabellag@unal.edu.co*

Palabras Claves: nutrientes del suelo; técnicas analíticas; variabilidad; modelos de regresión

Este estudio tiene como objetivo evaluar la equivalencia y la influencia de las propiedades del suelo en la medición de hierro, cobre, sulfatos y fosfatos utilizando diferentes técnicas analíticas. Se realizaron mediciones de estos nutrientes en 40 muestras de suelo con características fisicoquímicas diversas, empleando técnicas como plasma acoplado inductivamente, cromatografía iónica, espectrofotometría UV-Vis y absorción atómica. Además, se evaluaron ocho parámetros químicos del suelo, adicionales en cada muestra.
Se determinó el error entre los resultados obtenidos por las distintas técnicas para los nutrientes mencionados, encontrando valores de hasta el 50%. Se realizaron análisis de correlaciones y componentes principales (PCA) para identificar relaciones y patrones de variabilidad en el conjunto de datos. La Figura 1 muestra el biplot encontrado para el cobre, evidenciando el efecto de las variables estudiadas sobre el error (diferencia).

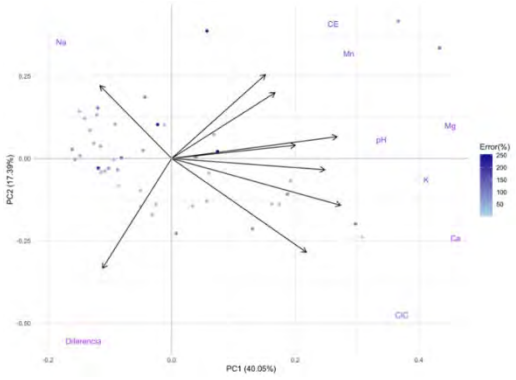


Figura 1: Efecto de las variables estudiadas sobre el error (Diferencia) para el cobre.

Finalmente, se desarrollaron modelos de regresión múltiple para comprender la influencia de cada factor en el error entre las técnicas analíticas utilizadas. Los modelos propuestos lograron explicar entre el 75% y el 80% del error para hierro, cobre y fósforo. Sin embargo, para azufre se concluyó que la información recopilada no fue suficiente para obtener un modelo explicativo significativo.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-273-P ***ESTIMACIÓN DE INCERTIDUMBRE EN EL ÁNALISIS DE CADMIO EN AGUA POR HORNO DE GRAFFITO-ABSORCIÓN ATÓMICA CON CALIBRACIÓN NO-LINEAL***

Estimación de Incertidumbre en el Ánalisis de Cadmio en Agua por horno de graffito-Absorción Atómica con calibración no-lineal

Edwin J. Alzate-Rodríguez [1, 2, *], Olga I Vallejo-Vargas[1, 2], Carlos H Montoya-Navarrete [1, 2], Leonardo Beltrán-Angarita[1, 2, 3]

[1]. *Water Resource Study Group (GERH), School of Chemistry, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.*
[2]. *Water and Food Analysis Laboratory, School of Chemistry, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.*
[3]. *Faculty of Health Sciences, Unidad Central del Valle del Cauca, Colombia.*

* Corresponding author.
e-mail address: jhovalz@utp.edu.co, https://orcid.org/0000-0002-5174-2763. Universidad Tecnológica de Pereira. La Julita, Pereira, Colombia.

Palabras Claves: Incertidumbre de medición; espectroscopia de absorción atómica en horno de grafito; calibración no lineal; polinomio de segundo orden.

Se evaluó la incertidumbre de medida del análisis de cadmio en una muestra de agua mediante espectroscopia de absorción atómica en horno de grafito (GFAAS) en matriz acuosa. El método analítico implica una digestión ácida previa y una filtración de la muestra acuosa, seguidas de una dilución utilizando una pipeta y un matraz aforado, para estimar la concentración de cadmio a partir de una curva patrón de calibración. Las concentraciones de los patrones de calibración oscilaban entre 0 y 5 µg/L, valores típicos del atomizador de horno de grafito más sensible. El ajuste por mínimos cuadrados para el análisis de niveles traza de metales por GFAAS suele arrojar una curva de calibración con una curvatura notable que no puede modelarse con precisión mediante una línea recta, por lo que se utilizó un polinomio de segundo orden para el método de calibración. Las fuentes de incertidumbre identificadas para la estimación de la incertidumbre de este método fueron la repetibilidad, la dilución de la muestra y el ajuste por mínimos cuadrados de la curva de calibración. Se describe detalladamente la evaluación de la incertidumbre estándar debida a la contribución no lineal de segundo orden de la curva de calibración, ya que la mayoría de las referencias sólo tratan el caso lineal. La incertidumbre expandida fue de 0,49 µg/L, derivada de una incertidumbre estándar combinada de 0,23 µg/L, un factor de cobertura de 2,13 con un valor de grados de libertad efectivos de 15 y una confianza del 95 %, para una muestra que contiene 9,31 µg/L de cadmio. La mayor contribución a la incertidumbre procede de la regresión no lineal por mínimos cuadrados.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-297-P ***CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL DEL EXTRACTO ALCOHÓLICO DEL ASAÍ LIOFILIZADO COLOMBIANO.***

Caracterización Estructural Del Extracto Alcohólico Del Asaí Liofilizado Colombiano.

Daniel C. Ferrer [a], **Daniel Gallego** [a*], **Judith H. Ojeda** [a], **Erika Y. Soto** [a,b]

[a] *Grupo Diseño y Síntesis de Sistemas Químicos, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia-UPTC, Colombia*
[b] *Grupo de Investigación en Ciencias Básicas Aplicación e Innovación-CIBAIN, Universidad Internacional del Trópico Americano-Unitrópico, Colombia*
** Autor de correspondencia: daniel.gallego@uptc.edu.co*

Palabras Claves: Açai; colorantes naturales; extracción; caracterización

La producción del fruto de asaí colombiano ha venido en aumento debido a la necesidad de suplir la demanda internacional dada su alta dependencia gestacional. Además de presentarse como suplemento alimenticio, el fruto de asaí presenta un alto contenido de agentes colorantes que pueden presentar aplicabilidad en electrónica molecular, en especial con dispositivos fotovoltaicos. En este sentido, el objetivo del siguiente estudio fue caracterizar por medio de técnicas analíticas instrumentales los colorantes naturales presentes en el extracto alcohólico del asaí liofilizado colombiano. Así, la extracción de las moléculas colorantes se llevó a cabo mediante métodos de extracción solido-líquido a temperatura ambiente y extracción asistida por ultrasonido y microondas, usando etanol (EtOH) acidificado (CH_3COOH o HCl). Se determinó a través del análisis cualitativo de cromatografía en capa fina la presencia de 2 compuestos, uno de naturaleza polar y el otro no polar. Luego se caracterizó por técnicas espectroscópicas como: espectroscopia Ultravioleta visible (UV-Vis), Resonancia magnética nuclear (RMN ^{1}H, y ^{13}C), Espectroscopia infrarrojo con transformada de Fourier (FTIR). Los resultados obtenidos evidencian que independiente de la técnica de extracción, no hay cambios en la composición del fruto. Por otra parte, el análisis espectroscópico evidencia que el componente mayoritario en estos extractos probablemente sea un acido graso, ya que por RMN y FTIR las características espectroscópicas atribuyen la presencia de este. Sin embargo, el análisis de espectroscopia UV-vis muestra la presencia de antocianinas debido a ciertas bandas representativas de este compuesto.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-298-P ESTUDIO DE LOS COMPUESTOS VOLÁTILES FLORALES DE LAS ESPECIES ANTHURIUM CARAMANTAE ENGL Y STENOSPERMATION WEBERBAUERI ENGL (ARACEAE) MEDIANTE UNA APROXIMACIÓN METABOLÓMICA

Estudio de los compuestos volátiles florales de las especies *Anthurium caramantae* Engl y *Stenospermation weberbaueri* Engl (Araceae) mediante una aproximación metabolómica

Eliana Alvarez Valdez [a*]; **Natalia Castaño Rubiano** [a]; **Gonzalo Taborda Ocampo** [a]

[a] *Grupo de Investigación de Cromatografía y Técnicas Afines (GICTA) Universidad de Caldas. Manizales, Caldas*

* eliana.16820120624@ucaldas.edu.co

Las plantas producen compuestos orgánicos volátiles biogénicos (BVOCs) que desempeñan roles clave en procesos fisiológicos como la defensa contra insectos, la atracción de polinizadores y la comunicación celular. La familia Araceae emite BVOCs durante su floración para atraer polinizadores y a pesar de que se ha estudiado la familia, la mayoría de las investigaciones se han centrado en unos pocos géneros. En Colombia, con una diversidad endémica en especies de la familia, la composición química de especies en sus compuestos florales no ha sido exhaustivamente investigada. Para abordar esta brecha, se analizaron los compuestos volátiles de dos especies nativas: *Stenospermation weberbaueri* y *Anthurium caramantae* usando una metodología metabolómica que incluye la extracción de volátiles por medio del análisis por espacio de cabeza dinámico de inflorescencias en fases femeninas y masculinas de las plantas de cada especie. Los compuestos volátiles fueron analizados por cromatografía de gases y espectrometría de masas, que posteriormente por medio de un análisis discriminante de mínimos cuadrados parciales, se pudo identificar los compuestos clave para distinguir entre fases y los metabolitos más importantes en el proceso de floración de las inflorescencias. En *A. caramantae*, se identificaron 19 BVOCs, siendo la 2-nonanona el compuesto más abundante. El perfil volátil de *S. weberbaueri* incluyó 44 BVOCs, destacando el 3-pentanol con la mayor concentración, y siendo la primera vez que se reporta en esta familia. Los compuestos en *A. caramantae* se derivan principalmente de ácidos grasos, mientras que en *S. weberbaueri* la mayoría de los compuestos provienen principalmente de terpenos. El estudio ofreció un análisis novedoso de BVOCs en dos especies de Araceae. Los resultados dan a conocer información sobre la química floral de especies nativas de Colombia que avalan la importancia en la conservación y manejo de ecosistemas.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-304-P ***USO DE ÁCIDO ASCÓRBICO COMO MODIFICADOR DE MATRIZ PARA LA DETERMINACIÓN DE VANADIO EN SUELOS MEDIANTE SLURRY SAMPLING HACIENDO USO DE LA TÉCNICA DE ESPECTROSCOPÍA DE ABSORCIÓN ATÓMICA DE FUENTE CONTINUA Y ALTA RESOLUCIÓN (HR-CS-AAS)***

Uso de Ácido Ascórbico como Modificador de Matriz para la Determinación de Vanadio en Suelos Mediante Slurry Sampling Haciendo Uso de la Técnica de Espectroscopía de Absorción Atómica de Fuente Continua y Alta Resolución (HR-CS-AAS)

Johann Ramirez [a], **Ricardo E. Rivas** [a,*]

[a] *Grupo de Espectrometría Analítica Aplicada, Universidad de los Andes, Colombia*
** Autor de correspondencia: re.rivas@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: Absorción atómica en horno de grafito con fuente continua de alta resolución (HR-CS-ETAAS), Slurry sampling, Vanadio, Modificador químico de matriz, Ácido ascórbico.

El vanadio es un elemento ampliamente usado en la industria, específicamente en la manufactura de distintos tipos de aceros. Los compuestos derivados de este metal o provenientes de la quema de combustibles fósiles son liberados al ambiente contaminando los suelos. Posterior a los procesos de erosión y drenado, el vanadio puede transferirse a las fuentes hídricas, utilizadas para riego de cultivos alimenticios y en última instancia, llegar al cuerpo humano desencadenando un problema de salud pública. Una de las técnicas más utilizadas para llevar a cabo la determinación de vanadio en suelos es la de absorción atómica, requiriendo por lo general la digestión ácida de las muestras. En contraste, la preparación de la muestra en suspensión sólida (*slurry sampling*) representa una potencial ventaja, en vista de que no se requiere el proceso de digestión. Al hacer uso de la técnica de espectroscopía de absorción atómica de fuente continua de alta resolución (con atomización electrotérmica, o de horno de grafito), (HR-CS-ETAAS) se pueden observar simultáneamente varias líneas de absorción en una sola medida espectral. De esta manera, según la intensidad de la línea escogida, puede adaptarse de manera muy práctica la sensibilidad del método, aunque resulte afectada por la formación de carburos de vanadio dentro de las paredes del sistema de atomización (horno de grafito). Este inconveniente puede resolverse haciendo uso de sustancias conocidas como "modificadores de matriz", que evitan la formación de dichos carburos, generando una atomización óptima del elemento con señales uniformes, sin colas y del tipo idealmente gaussianas. Los modificadores mejoran no solo la sensibilidad analítica del método sino también de la repetibilidad de las medidas. Algunos de estos tienen la particularidad de ser elementos costosos y de rara accesibilidad como iridio, rodio, niobio, entre otros. En la presente metodología se utilizó ácido ascórbico, mucho más económico y asequible, encontrando optimas señales que permitieron la respectiva determinación de forma trazable utilizando un material de referencia de suelos (SQC001). El método desarrollado resultó ser rápido, económico, con uso de muestra por el orden de miligramos, poco energético al no usar digestión (habitualmente microondas), y "verde" al generar muy pocos residuos.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

COMPARACIÓN DE MÉTODOS PARA DETERMINAR CARBONO ORGÁNICO EN EL SUELO

Deysis B. Galván Amaya [a*]. Martha L. Castellano Martínez [b.] Aldair Duarte Sánchez [c].

[a,b,c,] *Grupo de investigación: Territorio Semiárido del Caribe, Universidad de La Guajira, Colombia.*

** Autor de correspondencia: dgalvana @uniguajira.edu.co*

Palabras Claves: Digestión, Método, Oxidación, Espectrofotometría.

El carbono orgánico total (COT) del suelo por su efecto benéfico sobre las propiedades físicas, químicas y biológicas, es considerado como uno de los principales indicadores de calidad del suelo, por lo que es necesario determinarlo con suficiente exactitud. Para los suelos en zonas secas (áridos, semiáridos y subhúmedas secas), los cuales son predominantes en La Guajira, se compararon las técnicas de determinación de COT de Walkley & Black (método de combustión húmeda, lectura por espectrofotometría - CIAT) e Icontec NTC 5403:2021 (es una modificación al método de Walkley & Black). El diseño de muestreo fue completamente al azar con tres factores (origen de la muestra, método de análisis, número de analistas), con 9 repeticiones de muestras de suelo. Los resultados obtenidos señalan una alta regresión (R^2 = 0,99), desviación estándar de α a 95%, de 0,68 y un coeficiente de variación de los tratamientos (que involucran los factores mencionados), fue cv =5,16, indicando que existe una leve diferencia entre las técnicas Walkley & Black CIAT e Icontec; en relación con los estadísticos de variabilidad nos indican que la técnica de Walkley & Black CIAT es mucho más preciso y exacto, por lo tanto es más eficiente para determinación de COT para las condiciones del laboratorio de la Universidad de La Guajira. Por esta razón se recomienda utilizar la técnica de Walkley & Black espectrofotométrica de reflujo cerrado (CIAT) para determinación de este parámetro de calidad para el matriz suelo.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-324-P ***IMPLEMENTACIÓN DE UNA METODOLOGÍA ANALÍTICA PARA CUANTIFICACIÓN DE ELEMENTOS POTENCIALMENTE PELIGROSOS (EPPS), PRESENTES EN MATRICES MEDIO AMBIENTALES, MEDIANTE EXTRACCIÓN CON MICROONDAS POR ICP-MS***

Implementación De Una Metodología Analítica Para Cuantificación De Elementos Potencialmente Peligrosos (EPPs), Presentes En Matrices Medio Ambientales, Mediante Extracción Con Microondas Por ICP-MS.

Edith J. Muñoz [a*], **Christian F. Gómez** [b], **Luis A. Gutiérrez** [c], **Rodrigo Pérez**[d]

[a] *Grupo de trabajo Geoquímica Inorgánica y Ambiental, Dirección de Laboratorios, Servicio Geológico Colombiano, Colombia.*
ejmunoz@sgc.gov.co

Palabras claves: Elementos Potencialmente Peligrosos (EPP); Matrices Medio Ambientales; Espectrometría de Plasma con Acoplamiento Inductivo (ICP-MS); Microondas; Materiales de Referencia Certificados (MRC).

Los EPP en el ambiente pueden ser de origen geogénico o antropogénico. Los elementos de origen geogénico proceden de material parental, actividad volcánica o lixiviación de mineralizaciones. Los EPP antropogénicos derivan de residuos de actividades industriales, minería, industria agrícola y residuos urbanos. Estos elementos en el ambiente representan alteraciones a los diferentes ecosistemas dado su toxicidad sobre la biota y amenazas sobre la salud humana, dependiendo de su concentración, movilidad y potencial para lixiviarse de perfiles del suelo hacia el agua subterránea difiriendo si su origen es natural o antrópico.

Se realizaron procedimientos de extracción asistidos por microondas, utilizando ácidos nítrico y clorhídrico en MRC de suelos, sedimentos y se prepararon muestras de agua enriquecidas con diferentes concentraciones de EPP. Se empleo el método EPA 3051A, con variaciones de parámetros como cantidad de ácidos, tiempos y temperaturas de rampa de calentamiento, etc. Se utilizó un sistema automatizado para digestión y preparación por microondas MultiVIEW-AutoLOADER, EasyPREP (SPC Science). Para la cuantificación se empleó el equipo ICP-MS PlasmaQuant Elite S (Analytik Jena). Se optimizaron las condiciones para cada elemento, utilizando curvas de calibración multi-mielemental en µg/l, obteniendo coeficientes de correlación superiores a 0,999.

Se analizaron resultados de varios MRC de las matrices de estudio. El criterio de evaluación de datos se realizó teniendo en cuenta el valor obtenido y el valor certificado; la comparación se ajustó al valor con un 95% de confianza. La desviación estándar para cada mensurando se calculó mediante la ecuación de Horwitz a cualquier concentración del analito. Se espera que el valor Z, calculado a partir de la incertidumbre del valor de Horwitz, se encuentre entre ($-2 < Z < 2$). Los analitos Ag, As, Bi, Cd, Co, Cr, Cu, Ni, Pb presentaron porcentajes de recuperación mayores al 90% y valores Z entre -2 y 2. La metodología implementada demostró ser eficiente para el propósito de cuantificación de los EPP en matrices medio ambientales. Se proyecta realizar mejoras en la metodología de extracción y optimización de los parámetros instrumentales, para que elementos como Se, Sb, V y Zn cumplan el criterio de aceptación.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-326-P ***ELEMENTOS POTENCIALMENTE PELIGROSOS EN COLOMBIA: ESPECIACIÓN DE ARSÉNICO EMPLEANDO HPLC-ICP-MS***

Elementos Potencialmente Peligrosos en Colombia: Especiación de Arsénico Empleando HPLC-ICP-MS

Rodrigo Pérez[a], Luis A. Gutierrez[a*], Edith J. Muñoz[a]

[a] *Grupo de Geoquímica Inorgánica y Ambiental, Dirección de Laboratorios, Servicio Geológico Colombiano.*

**Autor de correspondencia: lgutierrez@sgc.gov.co*

Palabras Claves: Arsénico, Especiación, Movilidad, HPLC-ICP-MS, Suelos, Sedimentos, Contaminación Geológica, Salud Pública.Título del trabajo: Especiación y Movilidad de Elementos Potencialmente

Resumen:

En respuesta a las políticas de protección del medio ambiente, especialmente en el impacto de actividades antropogénicas y geogénicas en fuentes de agua, el Servicio Geológico Colombiano, a través de la Dirección de Laboratorios, ha realizado avances significativos en el estudio de contaminantes elementales denominados como Elementos Potencialmente Peligrosos (EPPs). En el presente trabajo se muestran los avances alcanzados por el Laboratorio de Geoquímica Inorgánica y Ambiental en la caracterización de EPPs, centrándose particularmente en la especiación de arsénico, uno de los elementos más tóxicos y estudiados a nivel mundial. Para hacerlo, se empleó la cromatografía líquida de alta resolución acoplada a espectrometría de masas con plasma acoplado inductivamente (HPLC-ICP-MS). Esta técnica permitió la separación y cuantificación precisa de las especies de arsénico presentes en muestras acuosas, proporcionando una distinción clara de su distribución química en el medio ambiente. Los resultados obtenidos demostraron la eficacia del método, mostrando un límite de cuantificación de 100 ng/l de arsénico usando iCRC (He=110-150 ml/min). La especiación de estos elementos es crucial para evaluar su grado de toxicidad y su potencial impacto en el medio ambiente.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-357-P ***DETERMINACIÓN DEL PERFIL MOLECULAR DE STAPHYLOCOCCUS AUREUS EN ESTADO BIOFILM EMPLEANDO MS-MALDI-TOF***

Determinación del Perfil Molecular de *Staphylococcus aureus* en Estado *Biofilm* Empleando MS-MALDI-TOF

Willy Colán [a,b], Sara M. Rueda [a,c], Yuly A. Prada [a,b], Jennifer A. Ruiz [a,c], Claudia C. Ortiz [a,c] *

[a] *Grupo de investigación en bioquímica y microbiología, Universidad Industrial de Santander. Colombia*

[b] *Escuela de Química, Facultad de Ciencias, Universidad industrial de Santander, Colombia*

[c] *Escuela de microbiología, Facultad de Salud, Universidad industrial de Santander, Colombia*

* *Autor de correspondencia: ortizc@uis.edu.co*

Palabras Clave: Perfil molecular; Espectrometría de masas; MALDI-TOF; *S. aureus*

La espectrometría de masas MALDI-TOF es una técnica confiable y eficiente para la identificación de género y especie de bacterias, convirtiéndose en una herramienta importante para la detección de bacterias de importancia clínica como *S. aureus*. Recientemente, se han realizado estudios para la recopilación de información relacionada con biomarcadores de resistencia, formación de *biofilm* o factores de virulencia a partir de los perfiles moleculares. Sin embargo, se ha dado poca importancia al impacto que tienen los protocolos de preparación de la muestra sobre la calidad y cantidad de las señales provenientes de los iones con relaciones masa-carga (m/z) requeridas en el análisis computacional para la elucidación de nuevos biomarcadores. En este sentido, el presente estudio evaluó cuatro protocolos de extracción de moléculas expresadas por las cepas *S. aureus* ATCC 29213 y *S. aureus* ATCC 43300 en estado planctónico y sésil. Los protocolos de extracción estudiados fueron los siguientes: i) acetonitrilo: ácido fórmico (ACN:AF); ii) cloroformo:metanol ($HCCl_3$:MeOH); iii) buffer de lisis (BL); iv) kit BugBuster®. Una vez obtenidos los extractos, se verificó la presencia de proteínas empleando geles de poliacrilamida y se cuantificó su concentración, empleando el ensayo de Bradford. Todos los extractos fueron analizados mediante espectrometría de masas con ionización/desorción asistida por una matriz y analizador de tiempo de vuelo (MS-MALDI-TOF). Los datos correspondientes a los perfiles moleculares de cada cepa fueron tratados utilizando análisis por componentes principales (PCA) en lenguaje de programación Python. Las extracciones obtenidas empleando $HCCl_3$:MeOH y BL, permitieron obtener una mayor concentración de proteína (~0.4 mg-mL^{-1}). Adicionalmente, las muestras provenientes de la extracción con BL mostraron señales (m/z) únicas y diferenciables en los espectros de masas respecto a los demás protocolos de extracción. Estas señales podrían estar asociadas a moléculas intracelulares como proteínas y péptidos relacionados con biomarcadores. En cuanto al protocolo de extracción ACN:AF, brindó una elevada confiabilidad respecto a la clasificación por género y especie de cada bacteria. Sin embargo, resultó muy limitado cuando se realizó la búsqueda de biomarcadores en la formación de *biofilm*.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-360-P ***ESTUDIO Y ANÁLISIS DE ASPARAGINA MEDIANTE ELECTROFORESIS CAPILAR CE-DAD EN MUESTRAS DE PANELA***

Estudio y Análisis de Asparagina Mediante Electroforesis Capilar CE-DAD en Muestras de Panela

Edna Herrera-Ramirez[a] *, Mariana Benavides Vesga[b], Chiara Carazzone[b], Wilson Barón[a], Héctor Suarez[a],
[a] Instituto de Ciencia y Tecnología de Alimentos – ICTA, Universidad Nacional de Colombia, Colombia.
[b] Laboratory of Advanced Analytical Techniques in Natural Products – LATNAP, Universidad de los Andes, Colombia.

** Autor de correspondencia: edherrerar@unal.edu.co*

Palabras Claves: Asparagina, Electroforesis Capilar, Panela, Reacciones de Maillard, Acrilamida.

En el año 2002 surgieron grandes preocupaciones sobre la exposición a la acrilamida cuando se descubrió que se forma cuando ciertos alimentos se preparan a temperaturas generalmente superiores a 120 °C y con poca humedad, debido en parte a las reacciones de Maillard entre ciertos aminoácidos, como la asparagina (Asn) y azúcares reductores. Estas preocupaciones son debidas a que la International Agency for Research on Cancer (IARC) clasifica la acrilamida en la categoría 2A, definida como "probablemente cancerígeno para los humanos".

Se han caracterizado diferentes productos y matrices alimentarias en torno a la acrilamida y a sus precursores, detectándose en: productos de panificación, tortillas, nueces tostadas, sopas instantáneas, vegetales deshidratados, chocolates, entre otros. A esta lista se añade la panela, la cual es un producto obtenido de la extracción y evaporación de los jugos de la caña de azúcar, donde se ha reportado que la acrilamida y la asparagina presentan claras correlaciones. En el caso de moléculas como los aminoácidos, se han cuantificado por electroforesis capilar (CE), debido a que es una técnica analítica la cual permite la separación de diferentes analitos, también, obtener resultados en un corto tiempo, sin derivatizar, con alta eficiencia de separación y alta sensibilidad.

Por ello, en este trabajo se desarrolló un método para el análisis de Asn mediante electroforesis capilar DAD con el fin de caracterizar muestras de panela con concentraciones de acrilamida ya conocidas, así mismo, identificar si existe alguna correlación directa entre la Asn como precursor y la acrilamida. Esto se realizó con un buffer ácido de sales de fosfato y un estándar de Asn. Las condiciones en voltaje positivo que se optimizaron fueron: el método de preconcentración, el voltaje, longitud de onda y los parámetros de adquisición. Se logró identificar en los electroferogramas las señales que corresponden al aminoácido Asn en su forma protonada, se optimizaron las variables y se evidencio la presencia de Asn en un gran número de muestras de panela. Para concluir, se desarrolló y optimizó un método de análisis de Asn en CE - DAD y se estudió la presencia de esta molécula en muestras de panela.

Referencias

- Badui, S. (2006). Química de los alimentos (Quintanar Enrique, Ed.; Cuarta). Pearson Educación de México. www.pearsoneducacion.net
- EFSA. (2015). Scientific Opinion on acrylamide in food. EFSA Journal, 10. https://doi.org/10.2903/j.efsa.2015.4104

- Gómez-Narváez, F., Mesías, M., Delgado-Andrade, C., Contreras-Calderón, J., Ubillús, F., Cruz, G., & Morales, F. J. (2019). Occurrence of acrylamide and other heat-induced compounds in panela: Relationship with physicochemical and antioxidant parameters. Food Chemistry, 301. https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2019.125256
- Omar, M. M. A., Elbashir, A. A., & Schmitz, O. J. (2017). Capillary electrophoresis method with UV-detection for analysis of free amino acids concentrations in food. Food Chemistry, 214, 300–307. https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2016.07.060

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-362-P ***DETERMINACIÓN DE FÓSFORO DISPONIBLE EN LOS SUELOS DE LA ALTILLANURA COLOMBIANA POR EL MÉTODO DE RESINA DE INTERCAMBIO IÓNICO.***

Determinación de Fósforo Disponible en los Suelos de la Altillanura Colombiana por el Método de Resina de Intercambio Iónico.

Miller Mosquera [a*], **Víctor A. Jiménez** [a], **Raquel E. Monagas** [a], **Anna P. Miranda** [a], **Maria N. Ortiz**[a]

[a] *Laboratorio Agricola, Agropecuaria Aliar S.A., Puerto Gaitán-Meta, Colombia*
** Autor de correspondencia: miller.mosquera@aliar.com.co*

Palabras Claves: Fósforo en suelos, disponibilidad, fertilidad de suelo, resinas de intercambio iónico,

El fósforo es un nutriente sumamente importante para las plantas, pues es fundamental para diversos procesos químicos y biológicos en el suelo. Este elemento se encuentra en forma lábil y no lábil en los suelos y con el fin de determinar el contenido de fósforo asimilable por la planta se debe evaluar el P lábil el cual se transforma en P en solución, forma química en la cuál es absorbida por las raíces. Mundialmente la agricultura se ha ido enriqueciendo de métodos que buscan apoyar la implementación de agricultura de precisión, Colombia no ha sido la excepción, es por ello que el laboratorio agrícola de la compañía Agropecuaria Aliar S.A ha implementado de manera satisfactoria el método "Determinación de fósforo por resina de intercambio iónico" el cual consiste en extraer sólo el fósforo lábil unido al Fe y Al descartando el fósforo unido al Ca el cual no está disponible, simulando así el sistema de absorción de fósforo en las plantas, a diferencia de otros métodos que cuantifican el fósforo total del suelo. Métodos comúnmente usados como Mehlich-1 son no compatibles con zonas tropicales debido a la alta meteorización donde predomina el fósforo adsorbido con oxihidróxidos de Fe y Al, componente principal de los suelos arcillosos de la altillanura colombiana. Aplicar este método analítico en el laboratorio agrícola de Aliar S.A ha permitido entregar resultados más específicos en cuanto a las necesidades de los cultivos al área técnica de agricultura; posterior a esto, realizar una aplicación de cantidades suficientes de fertilizantes a los suelos que satisfagan la deficiencia de fósforo y, asimismo, no aplicar más de las dosis requeridas por el cultivo para evitar pérdidas por lixiviación. La implementación de este método no solo ha permitido innovar y ser pioneros en Colombia si no conseguir resultados altamente satisfactorios con una reducción económica del 30% en costos de fertilizantes.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-369-P ***RUTAS PARA EL DISEÑO RACIONAL DE SENSORES ELECTROQUÍMICOS BASADOS EN IMPRESIÓN MOLECULAR CON POLIPIRROL***

Rutas Para el Diseño Racional de Sensores Electroquímicos Basados en Impresión Molecular con Polipirrol

Harold H. Díaz [a]*, **Walter Torres**[b]

[a] *Grupo de Electroquímica, Universidad del Valle, Colombia*
[b] *Grupo de Electroquímica, Universidad del Valle, Colombia*

**Autor de correspondencia: walter.torres@correounivalle.edu.co*

Palabras Claves: Sensor voltamétrico; MIP; polipirrol; serotonina.

Los polímeros de impresión molecular (MIPs) se han utilizado en un número creciente de aplicaciones para el reconocimiento molecular sensible y selectivo. Con esta técnica es posible crear cavidades o sitios de interacción en forma de plantilla en películas de polímero que son complementarias en forma, tamaño y funcionalidad química a la molécula de analito utilizada como molde durante la electrosíntesis de polímeros.

La justificación del estudio de la síntesis electroquímica de electrodos modificados con polímeros conductores en presencia de triptófano (Trp), serotonina (5-TH) y melatonina, permite desarrollar herramientas de diagnóstico rápidas y confiables desde el laboratorio clínico tradicional hacia el punto de atención (*Point-of-Care Testing* - POCT) de los pacientes con la intención de obtener información útil para el personal de salud en la toma de decisiones referentes al diagnóstico y tratamiento en tiempos muy cortos.

En este trabajo, el concepto MIP se utilizó para mejorar el desempeño en términos de sensibilidad de estos sensores, y que además, permitan analizar una variedad de especies de interés bioquímico en fluidos biológicos en concentraciones del orden de nanomolar, actualmente somos capaces de hacer mediciones en el rango de submicromoles por litro. Para eso tenemos una estrategia racional de optimización de la sensibilidad de los sensores que implica tres rutas dos de las cuales son experimentales y otra computacional, optimizando los sensores verificando las condiciones de polimerización en función del potencial de polimerización en el rango de 0,7 V a 1,0 V y la optimización en términos de la sobreoxidación.

En trabajos previos nuestro grupo de investigación presentó en el desarrollo de sensores electroquímicos enantioselectivos, utilizando el concepto de MIP en polímeros conductores para la determinación rápida, secuencial y cuantitativa de los aminoácidos L-tirosina, L-triptófano, 5-HT y DA. Actualmente el proceso de electropolimerización de pirrol se realizó por medio de las siguientes técnicas: cronoamperometría, voltametría cíclica y pasos multipotenciales. Además, se variaron parámetros tales como el pH, concentración del analito, concentración del electrolito soporte y concentración del monómero, que pueden influir en el mecanismo de reacción durante la síntesis del PPy, impactando así las características morfológicas del polímero formado en el electrodo.

Bibliografía

1. Benedikt Keitel, Alex D. Batista, Boris Mizaikoff, Beatriz Fresco-Cala. Molecularly Imprinted Polymer Sensors for Environmental Analysis. **2023**, 851-867. https://doi.org/10.1016/B978-0-12-822548-6.00158-8.
2. Holze, R. Overoxidation of Intrinsically Conducting Polymers. ***Polymers (2022)***, 14, 1584. https://doi.org/10.3390/polym14081584.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-373-P ***DETERMINACIÓN DE TIOMERSAL EN VACUNAS POR CV-AAS UTILIZANDO NANOPARTÍCULAS HÍBRIDAS DE PUNTOS CUÁNTICOS DE GRAFENO-TIO2 COMO AGENTES FOTOCATALÍTICOS***

Determinación de tiomersal en vacunas por CV-AAS utilizando nanopartículas híbridas de puntos cuánticos de grafeno-TiO_2 como agentes fotocatalíticos

Jarol R. Miranda[a], Marlin J. Pedrozo[a], Joseane A. Mendes[a], Ricardo Q. Aulélio[a]

[a] *Laboratório de Eletroanalítica, Espectroanalítica y Análise Elementar Aplicada (LEEA), Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - PUC-Rio, Brasil*

**e-mail: jmirandaa83@live.com*

Palabras Claves: Tiomersal; Foto-degradación; Puntos cuánticos de grafeno-TiO_2; Absorción atómica; vapor frío.

El tiomersal ($C_9H_9HgNaO_2S$) se ha utilizado como conservante en cosméticos y productos farmacéuticos desde la década de 1930, previniendo la contaminación y garantizando la estabilidad del producto a largo plazo. Se ha demostrado que el tiomersal se degrada formando etilmercúrio (CH_3CH_2Hg) y ácido tiosalicílico. En los últimos años ha habido controversia sobre el uso de tiomersal en vacunas y productos farmacéuticos, ya que se considera un medio directo de contaminación por mercurio para los humanos y el medio ambiente. A efectos de evaluación de riesgos, es necesario un control preciso y cuidadoso de la dosis de tiomersal, en niveles ultra-traza, en vacunas y productos farmacéuticos. El presente trabajo describe un nuevo método para la determinación indirecta de tiomersal mediante espectroscopía de absorción atómica de vapor frío (CV−AAS), basado en la foto-degradación, utilizando nanopartículas híbridas de puntos cuánticos de grafeno soportadas sobre nanopartículas de dióxido de titanio (GQDs-TiO_2), en presencia de irradiación UV, que convierte el tiomersal en Hg^0. Para estudios de análisis preliminares, se mezclaron volúmenes de 200 µL de dispersión de nanomaterial (preparada con 30 mg de nanomaterial en 5 mL de agua) a una solución de 5 mL de tiomersal (2 µg L^{-1}) a pH 5 (ajustado con ácido sulfúrico solución). Estas soluciones, se transfirieron a tubos de cuarzo y se irradiaron con luz ultravioleta, bajo agitación continua. Las mejores condiciones del método se obtuvieron con 5 mL de solución que contenía 100 µL de dispersión GQDs-TiO_2 (3 mg mL^{-1}), (1% m/v) de ácido fórmico y con el pH ajustado a 4. En estas condiciones, se detectó el perfil temporal de Hg^0 referente al tiomersal después de 16 minutos de exposición a los rayos UV. Los límites de detección y de cuantificación del método fueron 15 ng L^{-1} y 28 ng L^{-1}, respectivamente. El método se aplicó para determinar el tiomersal en dos tipos de vacunas, contra la hepatitis B y la difteria-tétanos. Las concentraciones de tiomersal encontradas fueron (97,2 ± 1,6)% (n = 3) y (96,5 ± 3,0)% (n = 3) respectivamente para las vacunas contra la hepatitis B y difteria−tétanos.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Síntesis de solventes eutécticos profundos para su utilización como extractantes

J. Sebastian López [a], Lessly F. Romero [b], Karen V. Torres [c], Fernando J. Hernández [d*]

[a] *Grupo de Investigación de Química de Compuestos Bioactivos Q.C.B., Universidad del Cauca, Colombia*
[b] *Grupo de Investigación de Química de Compuestos Bioactivos Q.C.B., Universidad del Cauca, Colombia*
[c] *Grupo de Investigación de Química de Compuestos Bioactivos Q.C.B., Universidad del Cauca, Colombia*
[d] *Grupo de Investigación de Química de Compuestos Bioactivos Q.C.B., Universidad del Cauca, Colombia*
**Autor de correspondencia: fjhernandez@unicauca.edu.co*

Palabras claves: Síntesis; solventes eutécticos profundos; extractante,

Con este trabajo se busca identificar factores que pueden influir en la síntesis de solventes eutécticos profundos (DES, por sus siglas en inglés) y así una vez sintetizados establecer su solubilidad y su posible aplicación como extractante. Para la síntesis se seleccionaron diferentes dadores y aceptores de enlaces de hidrógeno entre los que se encuentran el cloruro de zinc, urea, glicina y ácido cítrico. Luego se tomaba un aceptor de enlaces de hidrógeno y un dador y se procedía a mezclarlos en diferentes relaciones molares (1:1, 1:2, 2:1, 3:1 entre otras). Las mezclas se ponían en un vial de 5 mL, seguidamente se calentaba a 60°C y se agitaba a 100 rpm durante 1 h o 1 h y 30 min (el tiempo depende del dador y el aceptor utilizado). El parámetro para establecer que se había formado correctamente el DES fue identificar que no haya presencia de sólidos en la mezcla y así dar finalizada la síntesis. Los resultados mostraron que adicionar el dador de enlaces de hidrógeno sobre el aceptor mejoraba los tiempos de síntesis; por otra parte, solo el DES a base de Cloruro de Zinc y Urea fue insoluble en agua, los demás DES sintetizados se solubilizan en agua, por lo anterior solo el DES a base de Cloruro de Zinc y Urea se utilizó en un proceso de microextracción líquido-líquido dispersiva ya que los analitos objetivo en primera instancia eran fármacos que actúan como contaminantes emergentes en medios acuosos, particularmente aspirina e ibuprofeno, además del ácido salicílico quien es el precursor de varios fármacos y uno de los productos de degradación de los mismos. En el proceso de microextracción se obtuvieron porcentajes de extracción hasta del 36,22 % como se observa en la tabla 1, (la identificación y cuantificación de los analitos se realizó mediante curva cromatográfica en uPLC-DAD y el proceso de extracción se desarrolló utilizando diseño experimental de Plackett-Burman y diseño factorial 2^2) además, se observó que el DES empleado en la microextracción se solidifica al interaccionar con el analito.

Tabla 1. Recobros obtenidos en el DoE 2^2 para DLLME-DES.

		% Recobro		
pH	Tiempo (min)	AAS	AS	IBU
4,0	5	18,07	32,50	21,44
6,0	10	27,28	30,67	28,63
4,0	5	21,66	32,61	22,04
6,0	5	20,80	29,81	25,85
6,0	10	28,82	29,24	24,57
4,0	10	22,17	34,33	25,82
6,0	5	22,23	33,98	19,48
6,0	5	23,83	30,48	19,89
4,0	10	23,30	35,37	23,79
4,0	5	17,44	32,05	21,20
,0	10	23,99	36,22	24,49
6,0	10	30,71	32,14	28,01

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-387-P ***ESTUDIO DE LA VARIABILIDAD ISOTÓPICA DEL ORO PROVENIENTE DEL DISTRITO MINERO PUERTO BERRÍO-PUERTO NARE, DEPARTAMENTO DE ANTIOQUIA, MEDIANTE LA TÉCNICA DE ESPECTROMETRÍA DE MASAS CON PLASMA DE ACOPLAMIENTO INDUCTIVO (ICP-MS)***

Estudio de la Variabilidad Isotópica del Oro Proveniente del Distrito Minero Puerto Berrío-Puerto Nare, Departamento de Antioquia, Mediante la Técnica de Espectrometría de Masas con Plasma de Acoplamiento Inductivo (ICP-MS)

Alejandra Álzate [a*], **Verónica Ruiz** [a], **Jhon J Rios** [b]

[a] *Grupo Investigación geoquímica y geofísica aplicada, Dirección de Recursos Minerales, Servicio Geológico Colombiano, Colombia*

[b] *Grupo de investigación en Electroquímica y Ambiente-GIEMA, Universidad Santiago de Cali, Colombia*

*aalzate@sgc.gov.co**

Palabras Claves: Espectrometría de masas; Espectrometría de Microfluorescencia de Rayos-X; Variabilidad elemental; Geoquímica; Perfil elemental.

Se realizó un estudio geoquímico para determinar la abundancia y variabilidad isotópica entre muestras de oro procedentes de procesamiento mineral de diferentes sectores del distrito Puerto Berrío-Puerto Nare, con el fin de caracterizar los isótopos que abarcan un rango desde ^{9}Be hasta ^{238}U. Este estudio hace parte del proyecto huella digital de minerales, que se fundamenta en la premisa de que el oro, asociado con un evento de mineralización específico o proceso extractivo, heredará una firma única de elementos traza de ese evento o proceso. El muestreo de campo se realizó en el distrito Puerto Berrío-Puerto Nare del departamento de Antioquia, donde se obtuvieron 11 muestras de fundidos de oro (Figura 1) y la cuantificación isotópica se ejecutó mediante la técnica de Espectrometría de Masas con Plasma de Acoplamiento Inductivo (ICP-MS). Además, se realizó un análisis previo mediante la Espectrometría de Microfluorescencia de Rayos-X (µFRX), donde se obtuvo información de los elementos mayores presentes en las muestras. Los resultados obtenidos por ICP-MS se trataron estadísticamente con la ayuda del *software* especializado RStudio para la generación de gráficas multivariables de análisis de componentes principales Biplot y multielementos. La visualización de las gráficas demostró una alta variabilidad isotópica en las muestras, y la existencia de correlaciones positivas que están dada por los isótopos:^{111}Cd, ^{66}Zn, ^{201}Hg,^{151}Eu, ^{59}Co,^{51}V, ^{72}Ge,^{191}Ir,^{45}Sc y correlaciones negativas de los isótopos: ^{181}Ta,^{62}Ni,^{238}U, ^{56}Fe, ^{63}Cu,^{182}W, ^{90}Zr, ^{93}Nb, ^{55}Mn, ^{62}Ni, ^{103}Rh, ^{185}Re, ^{77}Se, ^{47}Ti, ^{75}As, ^{52}Cr, ^{95}Mo, ^{140}Ce, ^{139}La,^{151}Eu, ^{51}V,^{72}Ge. Las correlaciones isotópicas de este estudio sugieren un perfil geoquímico único del oro en el distrito estudiado, lo que puede deberse a varios factores entre ellos: interacciones químicas, procesos geológicos que ocurren durante la formación de los depósitos de oro y procesos de beneficio. La aplicación de la técnica ICP-MS demostró eficiencia para este estudio y proporcionó información geoquímica para profundizar en el conocimiento del mineral en la zona.



Figura 1. Muestras de oro recolectadas para análisis por ICP-MS

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Comparación de Métodos UHPLC para la cuantificación de Tocoferoles y Tocotrienoles en Aceites y Grasas de Origen Amazónico

L.L. Orduz-Díaz [a], K. Lozano [a], M. P. Carrillo [a], J.E.C, Cardona - Jaramillo [a]*

[a] *Instituto Amazónico de Investigaciones Científicas - Sinchi, Colombia*
** Autor de correspondencia:* jcardona@sinchi.org.co

Palabras Claves: Amazonía; Aceites; Tocoferoles, Tocotrienoles, Vitamina E

La vitamina E es un nombre común para el conjunto de compuestos liposolubles formados por los tocotrienoles. (T3) y tocoferoles (T), que se denominan colectivamente tococromanoles los cuales funcionan como antioxidantes en el cuerpo humano. La región amazónica de Colombia ocupa el 42,42% del territorio continental del país y, gracias a su amplia biodiversidad, tiene potencial para la cosecha, procesamiento y comercialización de especies como *Carapa guianensis* (Andiroba), *Teobroma grandiflorum* (Copoazú), *Euterpe precatoria* (Asai), *Mauritia flexuosa* (Miriti), *Oenocarpus bataua* (Patawa), *Astrocaryum murumuru* (Murumuru), *Plukenetia volubilis* (Sacha Inchi), *Caryodendron orinocense* H.Karst. (Cacay o Inchi) que son potenciales fuentes de aceites y grasas. Tres métodos cromatográficos (UHPLC), uno en fase normal y dos en fase reversa se desarrollaron utilizando un equipo Agilent 1260 Infinity II UHPLC con detector DAD y FLD. Aunque no se logró la separación de lo isómeros β y g usando la columna ZORBAX Eclipse Plus C18 (2.1 x 100mm, 1.8µm), si fue posible la identificación y cuantificación simultanea de siete isómeros de la vitamina E (α-tocoferol, β-tocoferol, g-tocoferol d-tocoferol, α-tocotrienol, β-tocotrienol, g-tocotrienol) usando métodos gradientes en columnas Kinetex PFP (2.1 x150mm, 2.6µm) y Luna Silica (250×4.6mm, 3 µm) presentando alta reproducibilidad y coeficientes de correlación linear de 0.9900 en el rango de concentraciones de 1.0-25.0 µg mL -1 para la columna PFP y de 5.0-40.0 µg mL -1 para la fase normal.

Al realizar el análisis de aceites de origen amazónico se encontraron por lo menos dos isómeros de la vitamina E en los aceites de *Euterpe precatoria* Mart, *Caryodendron orinocense* H.Karst., *Astrocaryum murumuru*, *Carapa guianensis*, *Plukenetia volubilis* y *Mauritia flexuosa* L.f. siendo las dos últimas especies las que tienen mayor contenido de g-tocotrienol (1,795 µg/mg de muestra) y α-tocoferol (1,168 µg/mg de muestra), respectivamente. Fue posible concluir que los aceites de las seis especies estudiadas pueden ser utilizados como fuente de vitamina E para el sector alimentario, cosmético o farmacéutico siendo Sacha Inchi y Miriti los aceites más promisorios.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-412-P CARACTERIZACIÓN DE PARTÍCULAS DE ORO DE LOS MUNICIPIOS DE SANTO DOMINGO – SAN ROQUE (ANTIOQUIA) POR ESPECTROMETRÍA DE MICROFLUORESCENCIA DE RAYOS X

Caracterización de Partículas de Oro de los Municipios de Santo Domingo – San Roque (Antioquia) por Espectrometría de Microfluorescencia de rayos X

José B Ruiz [a]*, **Julián Vélez** [b]

[a] *Grupo Investigación geoquímica y geofísica aplicada, Dirección de recursos Minerales, Servicio Geológico Colombiano, Colombia*

[b] *Grupo de Caracterización de materiales de interés geológico, Dirección de Laboratorios, Servicio Geológico Colombiano, Colombia*

* *Autor de correspondencia: jbruiz@sgc.gov.co*

Palabras Claves: Espectrometría de Microfluorescencia de rayos X (µ-FRX); Petrografía; Oro; Geoquímica.

Se caracterizaron partículas de oro provenientes del departamento de Antioquia (Figura 1A) con el fin de conocer su composición química y la relación con minerales hospedantes o presentes en la mineralización. Este estudio hace parte del proyecto huella digital de minerales, que se fundamenta en la premisa de que el oro, asociado con un evento de mineralización específico o proceso extractivo, heredará una firma única de elementos traza de ese evento o proceso. Los granos de oro se encuentran en secciones delgadas pulidas, generadas a partir de muestras mineralizadas recolectadas en 7 frentes de explotación de minas localizadas en los municipios de Santo Domingo y San Roque. Se realizó petrografía por medio de microscopía óptica en el equipo Zeiss Axiocam 512 para identificar las asociaciones minerales, las partículas de oro y seleccionar aquellas que cumplían con un diámetro mayor a 100µm. Posteriormente se realizó un análisis elemental (Figura 1B), usando el equipo de microfluorescencia de rayos X (µ-FRX), M4 Tornado Plus marca Bruker (Figura 1C), el cual gracias a su spot de 20µm permite trabajar sobre este tamaño de partículas, logrando la identificación de elementos en el rango de carbono hasta uranio con sensibilidad de hasta 10 ppm.

Al realizar los análisis en granos de oro se identificó, además de Au y Ag como minerales principales, la presencia de elementos como S, Fe, Cu, Pb, Zn, Ca, Si y en menor proporción Bi, Sb, Te. Estos resultados permiten evidenciar que las concentraciones elementales se asocian con minerales identificados en este depósito, tales como pirita (FeS_2), calcopirita ($CuFeS_2$), galena (PbS), esfalerita (ZnS), galenobismutita ($PbBi_2S_4$), tetraedrita ($Cu_{12}(Sb,As)_4S_{13}$), telururos ($Au\text{-}AgTe_2$), cuarzo (SiO_2) y calcita ($CaCO_3$). Estos resultados evidencian las características y el alcance que se tienen con este equipo para mediciones puntuales en matrices metálicas y de sulfuros.

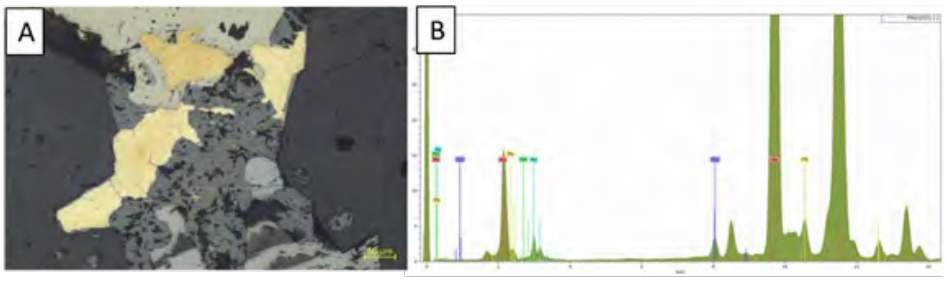


Figura 1. Las figuras corresponden: (A) microfotografía de oro y minerales asociados. (B) Espectro elemental.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Implementación de la Técnica HS-SPME-GC-MS para el Análisis de Compuestos Orgánicos Presentes en Aliento

Erica E. Villaroel[a*], Valentina Rodriguez[a], Gonzalo Taborda[a], Alavaro O. Pulzara[b]

a Grupo de Investigación en Cromatografía y Técnicas Afines (GICTA), Universidad de Caldas, Colombia
b Grupo de Investigación en Magnetismo y Materiales avanzados, Universidad Nacional Sede Manizales, Colombia
**Autor de correspondencia: erica.villaroel2168@udecaldas.edu.co*

Palabras Claves: compuestos orgánicos volátiles, microextracción en fase sólida, aliento exhalado, volatilómica

El aliento exhalado es una fuente no invasiva de compuestos orgánicos volátiles (VOCs) y existe un compendio de este tipo de compuestos que son emitidos por el cuerpo humano, observando 872 tipos y 11 familias de compuestos relacionados con la respiración. Sin embargo, en Colombia no se ha tenido un avance significativo en el análisis de volátiles en aliento que permita diferenciar los perfiles volatilómicos de acuerdo con los hábitos de la población. Por esta razón, mediante este estudio se implementó la técnica HS-SPME-GC-MS para analizar compuestos orgánicos volátiles reportados en aliento.

Se prepararon soluciones de 4 estándares 1-clorononano, metilsalicilato, 2,6-octadienal y citral, disueltos en glicerol. Para la preconcentración de los analitos se emplearon dos fibras SPME, una fibra comercial a base de PDMS/Carbowax/DVB (gris), y una fibra tipo lab-made a base de N-tinol con Silicio depositado mediante Magnetrón Sputtering. El diseño experimental 2^k, se evaluaron tres parámetros: agitación, temperatura, como variable de respuesta se usó el área del pico cromatográfico como se muestra en la figura 1.

Los resultados del diseño experimental se muestran en la figura 1

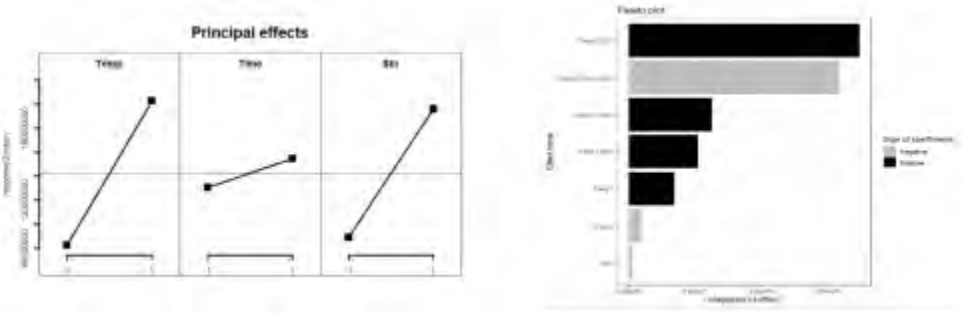


Figura 1. Diagrama de superficie de efectos principales y gráfico de Pareto para evaluar el comportamiento de los factores estudiados: Temperatura, agitación y tiempo

De acuerdo con los resultados obtenidos, se presenta mejor retención a temperaturas altas y mayor agitación se presenta una mayor retención de los estándares en solución cuando se usa glicerol como solvente, esto se debe a que se disminuye la viscosidad cuando se incrementan estos dos factores.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Conclusión

La fibra de PDMS/Carbowax/DVB presentó mejor eficiencia en el análisis de COVs mediante HS-SPME-GC-MS, comparada con la fibra lab-made a base de silicio. El tiempo de exposición de la fibra no tiene efectos representativos en los resultados mientras que la interacción de los tres factores mejora la preconcentración de los analitos.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

IV-476-P ***SÍNTESIS DE MEMBRANAS POLIMÉRICAS DE INCLUSIÓN EMPLEANDO UN LIGANDO DERIVADO DE TERPIRIDINA PARA EL ESTUDIO DE LA REMOCIÓN DE COBRE, ZINC Y MERCURIO EN MEDIOS ACUOSOS***

Síntesis de Membranas Poliméricas de Inclusión Empleando un Ligando Derivado de Terpiridina para el Estudio de la Remoción de Cobre, Zinc y Mercurio en Medios Acuosos

Ingri J. Reina[a], Germán Cuervo[a]* Daniel Fajardo[b], Danny Artega[b], Luis A. Lenis[b]

[a] *Grupo de Investigación en Procesos Electroquímicos - GIPEL, Universidad del Cauca, Colombia*
[b] *Grupo de Química de Productos Naturales, Universidad del Cauca, Colombia*
** Autor de correspondencia: ingrire@unicauca.edu.co*

Palabras Claves: Membranas de inclusión; Terpiridina; Remoción; Metales pesados.

Es un hecho que los medios acuáticos que contienen metales pesados se consideran un grave problema ambiental debido a la toxicidad y efectos nocivos para la salud. A raíz de esta problemática, ha cobrado gran importancia la implementación de métodos para la remoción de ese tipo de especies químicas de los recursos hídricos. Uno de estos métodos consiste en el uso de membranas poliméricas, el cual ha demostrado ser una alternativa viable ya que ese tipo de material puede ser empleado en varios ciclos de extracción y la cantidad de residuos que se genera es muy baja con respecto a los métodos convencionales.

En el presente trabajo se realizó la síntesis de membranas del tipo poliméricas de inclusión, empleando como agente de extracción el ligando orgánico derivado de terpiridina 4´-fenil-2,2´:6',2"-terpiridina**,** el cual es encargado de interactuar con los iones objetivo (Cu^{2+}, Zn^{2+} y Hg^{2+}). Tanto el ligando como los complejos formados se caracterizaron por espectroscopia FTIR y espectrometría de masas. Se logró identificar la formación de los respectivos complejos, que da paso al proceso de remoción monitoreado mediante voltamperometría cíclica. En resultados parciales, se observa que al evaluar las variables: composición de la membrana, pH y tiempo de contacto, a partir de un diseño experimental factorial 2^K con K=3 con puntos estrellas y dos puntos centrales, se evidencia mediante la técnica electroquímica de adsorción oxidación que con respecto a los metales analizados la membrana presenta mayor selectividad a los iones mercurio exhibiendo remociones de hasta el 96,44%.

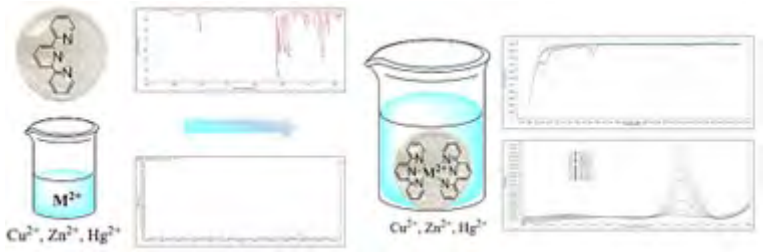


Figura 1. Proceso para el estudio de la remoción de Cu^{2+}, Zn^{2+} y Hg^{2+} de medios acuosos mediante el uso de un ligando terpiridínico contenido en membranas poliméricas.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

REFERENCIAS

[1] Conradie, J. (2022). Redox Chemistry of bis(terpyridine)manganese (II) complexes – A molecular view. Journal of Electroanalytical Chemistry, 913: 116272. https://doi.org/10.1016/j.jelechem.2022.116272

[2] Pabón, S. E., Benitez, R., Sarria – Villa, R. A., & Gallo, J. A. (2020). Contaminación del agua por metales pesados, métodos de análisis y tecnologías de remoción. Entre Ciencia e Ingeniería, 14, 27:9 – 18.

[3] Panicker, R. R., & Sivaramakrishna, A. (2022). Remarkably flexible 2,2´:6´,2" – terpyridines and their group 8 – 10 transition metal complexes – Chemistry and applications. Coordination Chemistry Reviews, 459, 2: 4426. https://doi.org/10.1016/j.ccr.2022.214426.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA DE ALIMENTOS Y AGROINDUSTRIA

XIV-95-P IDENTIFICACIÓN DE PLAGUICIDAS EN EL FRUTO EN S PIÑAS RECOLECTADAS EN LA CIUDAD DE SANTIAGO DE CALI, POR CROMATOGRAFÍA GASEOSA Y CROMATOGRAFÍA LÍQUIDA DE ALTA RESOLUCIÓN ACOPLADAS A ESPECTROMETRÍA DE MASAS

Identificación de Plaguicidas en el Fruto en s Piñas Recolectadas en la Ciudad de Santiago de Cali, por Cromatografía Gaseosa y Cromatografía Líquida de Alta Resolución Acopladas a Espectrometría de Masas.

Bieriz C. Yanes[a], **Santiago Valencia**[a], **Juan M. Peña**[b], **Nini J. Gutiérrez**[a*],

[a] Grupo de Investigación en Química y Biotecnología, QUIBIO, Universidad Santiago de Cali, Colombia.
[b] Grupo de Investigación Ciencia de Materiales Avanzados, Universidad Nacional de Colombia Sede Medellín; Colombia.

* Autor de correspondencia: nini.gutierrez00@usc.edu.co

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

El propósito del proyecto es investigar la presencia de compuestos agrotóxicos en muestras de piña comercializadas en la ciudad de Santiago de Cali, recolectadas en puntos de acopio masivo. La piña es una de las frutas de mayor consumo en la región y el país, pero para su óptima producción se requiere la aplicación de agrotóxicos para prevenir y repeler plagas y enfermedades.

La extracción de los analitos de interés y la limpieza de la matriz se realiza por medio del método QuEChERS en fase dispersa. Para la determinación de los plaguicidas, se utilizarán las técnicas de cromatografía líquida coplada a espectrometría de masas y cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas.

Se esperan obtener resultados que demuestren la existencia o no de residuos de plaguicidas en las muestras de piña analizadas. Diversos estudios demuestran residualidad de plaguicidas en alimentos cultivados en diferentes partes del mundo, al igual que se ha demostrado los riesgos de este tipo de compuestos agrotóxicos para la salud tanto animal como humana, causando intoxicaciones y daños al sistema nervioso.

De obtenerse resultados positivos de la presencia de los analitos en las piñas, permitiría comenzar la recolección de datos para estudios más completos que permitan tomar medidas para reducir su uso y minimizar los riesgos asociados con su consumo tanto para los agricultores como para los consumidores. Al ser la piña un fruto tropical ampliamente consumido y de gran demanda, los resultados de este estudio serían relevantes para investigaciones futuras.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-96-P ***EVALUACIÓN DE MARCADORES FITOQUÍMICOS ASOCIADOS CON PARÁMETROS FISICOQUÍMICOS PARA IDENTIFICAR GENOTIPOS DE AJÍ CON ALTO POTENCIAL COMERCIAL***

Evaluación de Marcadores Fitoquímicos Asociados con Parámetros Fisicoquímicos para Identificar Genotipos de Ají con Alto Potencial Comercial

Esteban Castaño Llanos[a], Maira A. Vega Muñoz[a], Juan C. Henao Rojas[b], Guillermo L. Montoya Peláez*[c]

[a] *Maestría en Ciencias Biotecnología, Departamento de Ciencias Farmacéuticas Químicas, Universidad Icesi. Cali, Valle del Cauca, Colombia*

[b] *Centro de Investigación La Selva, Agrosavia. Rionegro, Antioquia, Colombia*

[c] *Facultad de Ingeniería, Diseño y Ciencias Aplicadas, Escuela de Ciencias Aplicadas e Industria Sostenible, Universidad Icesi. Cali, Valle del Cauca, Colombia*

* *Autor de correspondencia: glmontoya@icesi.edu.co*

Palabras Claves: Capsicum; Diversidad; Capsaicinoides; Carotenoides; Triglicéridos

Los frutos del género *Capsicum* poseen un enorme potencial comercial por ser una excelente fuente de compuestos nutricionales, entre ellos vitamina C y E, provitamina A, antioxidantes, capsaicinoides que tienen propiedades analgésicas, antiinflamatorias, antimicrobianas y cardioprotectoras (Joshi et al., 2017). Esto los convierten en un alimento con alto potencial industrial, nutraceútico y farmacológico. Por otra parte, en Colombia se preservan más de 1.000 genotipos de *Capsicum* con 9 especies reportadas en los tres bancos oficiales de germoplasma vegetal (Instituto Sinchi, Agrosavia y Universidad Nacional de Colombia sede Palmira) donde la variedad y abundancia de sus compuestos bioactivos presenta una alta variabilidad. Sin embargo, la diversidad fenotípica de este género no ha sido estudiada exhaustivamente y la mayoría de los estudios se centran en la evaluación de características morfológicas. Es por ello que se bioprospectaron 237 accesiones de *Capsicum sp* del banco de germoplasma de Agrosavia, evaluando características como pH, sólidos solubles y totales, color, textura, capsaicinoides y carotenoides totales generando una clasificación bajo índices de interés agroindustrial. Además, se establecieron grupos fenotípicamente homogéneos mediante la aplicación de una metodología jerárquica analítica y se determinaron tres genotipos con características diferenciales a los que se les identificó su perfil lipídico mediante espectrometría de masas. La aplicación de criterios de puntuación y categorización permitió establecer un listado de materiales con características deseables para la industria de ají que pueden contribuir a la diversificación del cultivo y sentar las bases para la generación de productos de valor agregado. Esto no solo facilita la selección y priorización de genotipos, sino que también es de gran importancia para el desarrollo de estrategias de mejoramiento genético y aprovechamiento de la diversidad del ají en Colombia.

Joshi, D. D., Changkija, S., Sujata, W., Somkuwar, B. G., Rana, V. S., & Talukdar, N. C. (2017). Nutraceutical from Capsicum chinense fruits in shelf-stable herbal matrix. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, *42*, 130–137. https://doi.org/10.1016/J.IFSET.2017.06.006

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-101-P ***MONITOREO DE PARÁMETROS FISICOQUÍMICOS Y MICROBIOLÓGICOS EN LA FERMENTACIÓN DE CAFÉS ESPECIALES PRODUCIDOS EN NARIÑO COLOMBIA Y CORRELACIÓN DE ESTOS PARÁMETROS CON LA CALIDAD SENSORIAL DEL CAFÉ***

Monitoreo de Parámetros Fisicoquímicos y Microbiológicos en la Fermentación de Cafés Especiales Producidos en Nariño Colombia y Correlación de Estos Parámetros con la Calidad Sensorial del Café

Mayerlyn N Ortega [a], Arsenio H Troya [b], Nelson H Hurtado [a], Dolly M Revelo [c], *

[a] Departamento de Química, Universidad de Nariño, Colombia
[b] Departamento de Matemáticas y Estadística, Universidad de Nariño, Colombia
[c] Departamento de Biología, Universidad de Nariño, Colombia

** Autor de correspondencia: dmrevelor@udenar.edu.co*

Palabras Claves: fermentación de café; cafés especiales; HPLC; Path Análisis.

Como respuesta a la necesidad de generar alternativas para reproducir la calidad del Café de Nariño, en esta investigación se caracterizaron los procesos de fermentación de mucílago de café en las fincas Loma Gorda y La Mina del municipio de Buesaco bajo los métodos húmedo y similar a Honey, respectivamente. Se evaluaron variables ambientales, fisicoquímicas y microbiológicas a diferentes intervalos de tiempo sobre la calidad del café. Se observó un comportamiento de ciclo día-noche para la temperatura ambiente y la humedad relativa. Una disminución del pH y un aumento en la temperatura de la masa de fermentación en ambas fincas, y los grados Brix experimentaron variaciones tanto en aumento como en disminución en ambos procesos. Los grupos microbianos cuantificados durante la fermentación en ambas fincas fueron prevalentes en el siguiente orden: bacterias aerobias mesófilas, bacterias del ácido láctico, levaduras, bacterias del ácido acético y enterobacterias. Durante la fermentación también se determinó la concentración de azúcares, ácidos orgánicos y etanol empleando Cromatografía Líquida de Alta Eficiencia (HPLC). Los azucares mostraron una tendencia decreciente, siendo la sacarosa con 285,3 mg/L el azúcar más abundante en la finca Loma Gorda y la fructosa con 210,7 mg/L en la finca La Mina al inicio de los procesos de fermentación. Los ácidos orgánicos y el etanol presentaron un comportamiento creciente, el ácido láctico fue el principal ácido detectado, alcanzando concentraciones finales de 7,4 mg/L y 37,8 mg/L y el etanol de 17,5 mg/L y 19,7 mg/L en la finca Loma Gorda y La Mina respectivamente. La catación del producto fue realizada por un panel de 4 expertos empleando el protocolo de la *Specialty Coffee Association* (SCA). Las correlaciones entre las variables estudiadas y el puntaje de catación obtenidas por *Path Analysis*, permitieron establecer efectos de estas variables sobre la calidad final del café, por lo tanto, se resalta la importancia de medir estos factores durante los procesos de fermentación para garantizar a futuro la reproducibilidad de la calidad del Café de Nariño.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

EXTRACCIÓN DE INULINA DE LA CIDRA *Sechium edule* var. *albus levis* POR LA TÉCNICA DE ULTRASONIDO

Humberto Oliveros[a]*, Alba L Duque[a], Clara M Mejia[a]

GI: Agroindustria De Frutas Tropicales, Universidad Del Quindío, Colombia
* holiverosg@uqvirtual.edu.co

Palabras claves: Cidra; inulina; ultrasonido; extracción.

La cidra (*Sechium edule* (Jacq.) Sw.) es un fruto silvestre con propiedades benéficas para el organismo. Existen diferentes variedades, entre las que se encuentra, la cidra blanca o amarilla, *Sechium edule* var. *albus levis*, con una epidermis de coloración amarilla. Entre los compuestos de importancia presentes en la cidra se encuentra la inulina, polisacárido funcional natural, empleado como sustituto de la grasa para la producción de alimentos saludables bajos en lípidos. Esta fibra soluble ofrece ventajas en la alimentación, se digiere lentamente, lo que ayuda a estabilizar los niveles de glucosa e insulina en sangre, y generar saciedad al producir una sensación de llenura por más tiempo, lo que disminuye la ingesta calórica.

El objetivo de esta investigación fue extraer la inulina de la cidra *Sechium edule* var. *albus levis* mediante el método de ultrasonido. Se trabajaron muestras de cidra en base seca y en base húmeda. La cidra se cortó en láminas para el proceso en base húmeda, y para el proceso en base seca las láminas se secaron en horno de convección a 40 °C y se obtuvo la harina. Las condiciones de extracción por la técnica de ultrasonido fueron 45W y 54°C durante 1h, seguidamente se realizó la concentración de la solución por rotaevaporación a 55°C y precipitada con metanol. El contenido de inulina fue mayor en base seca (640 mg/mL) que en base húmeda (7.6 mg/mL), debido posiblemente al incremento de la superficie de contacto, lo que favorece la extracción, además al aumentar la concentración de carbohidratos en el secado de la muestra ya que la cidra contiene un alto contenido de agua.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-104-P ***EVALUACIÓN METABOLÓMICA DURANTE LA FERMENTACIÓN DE DIFERENTES MEZCLAS DE THEOBROMA CACAO PROVENIENTES DEL DEPARTAMENTO DE ARAUCA***

Evaluación Metabolómica Durante la Fermentación de Diferentes Mezclas de *Theobroma cacao* provenientes del Departamento de Arauca

Andrés F. Zorro [a-b]*, **Sandra M. Llano** [a], **Martha V. Zuluaga** [a], **Sebastián Escobar** [a], **Diana M. Ocampo** [b], **Fabrice Vaillant** [a,c]

a. *Laboratorio de Proceso y Calidad del Cacao, Corporación Colombiana de Investigación Agropecuaria (Agrosavia), Colombia.*
b. *Maestría en Química, Universidad de Caldas, Colombia.*
c. *Unité Mixte de Recherche Qualisud, Centre de Coopération Internationale en Recherche Agronomique pour le Développement, Francia.*

** Autor de correspondencia: azorro@agrosavia.co*

Palabras Claves: *Theobroma cacao*; Arauca; fermentación espontánea; metabolómica; UPLC.

El cacao colombiano como materia prima ha evolucionado tanto en el mercado nacional como el internacional. Tal reconocimiento no se debe a la cantidad producida, a pesar de ubicarse entre los 10 países más productores, sino a su calidad derivada de las características sensoriales que provee el fruto colombiano. En respuesta a la dinámica de producción cacaotera, se ha incentivado el estudio sobre la cadena de producción de cacao en sus diferentes etapas, buscando identificar en los granos de cacao metabolitos relacionados con la calidad sensorial del chocolate. Este proyecto de investigación es una iniciativa enmarcada dentro del proyecto de regalías "Cacao Arauca" y está fundamentado en la evaluación metabolómica durante la fermentación espontánea de *Theobroma cacao* proveniente de tres zonas agroclimáticas del departamento de Arauca.

En cumplimiento con el objetivo, se ha desarrollado una metodología en tres etapas: I) preparación de los extractos de granos de cacao tomados durante la fermentación espontánea por medio de un protocolo establecido en AGROSAVIA, el cual incluye un ciclo de agitación y un ciclo de extracción asistido por ultrasonido utilizando una solución de acetona/agua/ácido fórmico (70:29.9:0.1); II) análisis instrumental aplicando UPLC-MS, para metabolómica no dirigida, y UPLC-PDA, para metabolómica dirigida de teobromina, cafeína, catequina y epicatequina; III) análisis estadístico descriptivo e inferencial a través de herramientas como R Studio y SIMCA.

Finalmente, mediante el análisis dirigido y no dirigido se ha podido determinar que no existen diferencias significativas en la dinámica de comportamiento durante la fermentación espontánea de los metabolitos entre las tres regiones agroclimáticas del departamento de Arauca. No obstante, se evidencia una diferenciación en el comportamiento de los metabolitos a partir de las 48 horas de fermentación en el análisis no dirigido y a partir de las 72 horas de fermentación en el análisis dirigido de los polifenoles y metilxantinas estudiadas. Por otra parte, se espera realizar la identificación de los metabolitos discriminantes que por lo general son precursores del sabor y aroma como los azúcares reductores, polifenoles, péptidos, aminoácidos libres, entre otros.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Caracterización Fisicoquímica de la Bebida Fermentada Prebiótica a Partir de *Eugenia myrtifolia*

Yenny C. Parada [a*], **Clara M. Mejía** [a], **Jairo Montoya** [a]

[a]*Agroindustria de Frutas Tropicales, Universidad del Quindío, Colombia.*

**Autor de correspondencia*: ycparadac@uqvirtual.edu.co

Palabras Claves: Caracterización fisicoquímica; Eugenia; fermentación; kéfir; prebiótico.

La *Eugenia myrtifolia*, una fruta originaria del sur de Australia, ha sido fácilmente adaptada en América, sin embargo, su potencial nutracéutico y fisicoquímico sigue siendo ampliamente desconocido y poco aprovechado. En este contexto, el presente estudio se enfoca en realizar la caracterización fisicoquímica de una bebida fermentada prebiótica obtenida a partir del fruto de *Eugenia myrtifolia*. Para lograrlo, se implementó un proceso de fermentación artesanal utilizando kéfir como agente fermentativo (probiótico) e inulina como prebiótico, bajo condiciones controladas, tales como ausencia de luz y de oxígeno a temperatura ambiente. La fermentación se llevó a cabo durante aproximadamente15 días, hasta alcanzar las características fisicoquímicas establecidas en la NTC 223, Hao-Cheng et al. (2023)[1] y De la Cruz et al. (2012)[2]. En la tabla 1 se muestran los parámetros determinados, encontrando que en algunos de ellos hay diferencias significativas, esto debido a las diversas variables de fermentación, cepas microbiológicas y condiciones durante el proceso de elaboración.

Tabla 1. Resultados caracterización fisicoquímica de bebida fermentada prebiótica a partir de *Eugenia myrtifolia (Autora)*

PARÁMETRO	RESULTADO	LITERATURA
pH	3,2±0,01	3,86±0,01[1]
°Brix	2,2±0,02	28[1]
Grado de alcohol (%Vol)	6,0±0,04	14[1]
Densidad (g/mL)	1.002±0,01	1,067[2]
Color	a^* = 0,2±0,00 b^* = 13,4±0,003 L^* = 40,8±0,04 c = 13,6±0,00 h = 88,4±0,12	Tiende a tonos rojizos saturados (no reporta valores)[1]

Los resultados de este estudio proporcionan una base para el aprovechamiento y valorización de la *Eugenia myrtifolia* en la producción de bebidas fermentadas con potenciales propiedades funcionales.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Comparación Fitoquímica de Extractos de Cidra (*Sechium edule Jacq./Sw. Va. Virens levis)* Obtenidos por Diferentes Técnicas de Extracción.

Angie P. Acosta[a], María P. Benavides[a]*, Clara M. Mejía[a], Alba L. Duque[a]

[a] *Agroindustria de frutas tropicales, Universidad del Quindío, Colombia.*
**Autor de correspondencia: mariap.benavidesn@uqvirtual.edu.co*

Palabras clave: Extracto, fenoles, flavonoides, antioxidantes, ultrasonido.

La Cidra o Guatila es un fruto perteneciente a la familia *Cucurbitaceae*, originaria de Mesoamérica, ampliamente consumida en Latinoamérica y en distintos países del mundo con climas tropicales y subtropicales como es el caso de Colombia. Estudios fitoquímicos han descrito la utilidad y versatilidad de la cidra como planta fitoterapéutica tanto en nutrición como en su uso medicinal en forma de extracto debido a que contiene fenoles, antioxidantes, flavonoides, vitaminas, y otros compuestos de gran importancia. Por lo anterior se analizaron cuatro extractos de cidra obtenidos por diferentes técnicas de extracción con el fin de determinar que técnica es la más apropiada para obtener el extracto de cidra con un mayor aprovechamiento de sus componentes fitoquímicos, estos extractos se obtuvieron por técnicas sólido-líquido las cuales son: decocción (D), maceración etanólica con fruto fresco (MEFF), maceración etanólica con fruto seco sin pretratamiento de ultrasonido (MEFSSU) y con pretratamiento de ultrasonido (MEFSCU). Para el análisis y comparación de estos extractos se cuantificaron fenoles totales, capacidad antioxidante y flavonoides; además, se determinó la acidez titulable y vitamina C, los resultados del análisis fitoquímico se observan en la tabla 1.

Tabla 1. Análisis fitoquímico de extractos de cidra.

Extracto	Fenoles (mg AG /Lsln)	Vitamina C (mgAA/100gsln)	Flavonoides (µg Q/mL solución)	Antioxidantes (mgT/mlsln)	Acidez titulable (%AT)
D	2959,641±0,684	0,550±0,015	523,499±0,077	0,480±0,003	0,024±0,000
MEFF	2400,438±0,955	0,138±0,007	529,197±0,069	0,824±0,002	0,046±0,002
MEFSSU	2966,236±0,931	0,525±0,015	1437,745±0,047	0,818±0,001	0,137±0,005
MEFSCU	4266,011±0,841	0,791±0,015	2099,742±0,047	0,807±0,004	0,150±0,000

D: Decocción; MEFF: Maceración etanólica fruto fresco, MEFSSU; Maceración etanólica fruto seco sin ultrasonido; MEFSCU: Maceración etanólica fruto seco con ultrasonido; AG: Ácido gálico; AA: Ácido ascórbico; AT: Acidez titulable.

Los resultados de la tabla indican que el método de extracción MEFSCU obtuvo la mayor concentración en fenoles totales (4266,011 ± 0,8406mg AG/Lsln), vitamina C (0,791 ± 0,01490mg AA/100g solución), flavonoides (2099,742 ± 0,047µgQ/mLsln) y acidez titulable (0,15%AT), exceptuando la capacidad antioxidante que fue mayor en el método de extracción MEFF (0,824±0,00152mgT/mlsln). Por lo tanto, la técnica de extracción MEFSCU es la que conserva la mayor concentración de componentes fitoquímicos del extracto de cidra y aprovechamiento para productos de uso fitoterapéuticos.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-107-P ANÁLISIS DE CAROTENOIDES Y CLOROFILAS EN HOJAS DE AGRAZ (VACCINIUM MERIDIONALE) POR CROMATOGRAFÍA LÍQUIDA DE ULTRA ALTA EFICIENCIA EN FASE REVERSA CON DETECTOR DE ARREGLO DE DIODOS (RP-UHPLC-DAD)

Análisis de Carotenoides y Clorofilas en Hojas de Agraz (*Vaccinium meridionale*) por Cromatografía Líquida de Ultra Alta Eficiencia en Fase Reversa con Detector de Arreglo de Diodos (RP-UHPLC-DAD)

Carlos-Eduardo Narváez-Cuenca [a*], Juliana Cañón-Farieta [a], Teresa Mosquera [b]

[a] *Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Food Chemistry Research Group, Carrera 30 No 45-03, Bogotá, Colombia.*

[b] *Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Facultad de Ciencias Agrarias, Departamento de Agronomía, Carrera 30 No 45-03, Bogotá, Colombia.*

**Autor de correspondencia: cenarvaezc@unal.edu.co*

Palabras clave: β-caroteno; isómeros *cis-trans*; clorofila a; clorofila b.

Los carotenoides y clorofilas participan activamente en el uso eficiente del agua y nitrógeno, por lo que la selección de genotipos con alto contenido en estos bioactivos representaría una ventaja. En Colombia el agraz es promisorio y no hay un método cromatográfico para el análisis de esos compuestos en hojas. Se evaluó el efecto de la composición de dos mezclas de extracción (ME) [ME-I: hexano:acetona:metanol (2:1:1 *v/v/v*); ME-II: metanol:acetato de etilo:éter de petróleo (1:1:1, *v/v/v*), ambos SE contenían BHA 0,5% *p/v*)] y del carbonato de magnesio sobre la extracción de carotenoides y clorofilas de hojas de agraz. Para el análisis cromatográfico por RP-UHPLC-DAD se evaluó el efecto de la fase estacionaria, la composición de fases móviles y el programa de elusión, sobre diversos parámetros cromatográficos. La identificación de carotenoides se basó en la estructura fina espectral (III/II%), la intensidad *cis* máxima (II/B) y análisis del orden de elusión. Además, *all-trans*-luteína y *all-trans*-β-caroteno se identificaron por comparación de parámetros cromatográficos y espectroscópicos con estándares auténticos. Las clorofilas se identificaron por análisis del orden de elusión y del espectro UV-Vis. Los carotenoides se cuantificaron por estándar externo con *all-trans*-β-caroteno y las clorofilas por ley de Lambert-Beer. Se halló que la ME-I extrae un mayor contenido de carotenoides que la ME-II y que aunque ambas ME extraen una cantidad similar de clorofilas, con la ME-I hay mayor precisión en la cuantificación. La evaluación de diversos métodos cromatográficos permitió encontrar uno adecuado con diez picos cromatográficos, anchos de pico: 0,1-0,7 min, resoluciones: 0,4-13,6 min, factores de asimetría: 1,9-2,9 min y tiempo efectivo de elusión: 11,6 min. Además, el carbonato de magnesio inhibió la conversión de clorofilas b y b´ en sus feofitinas. Se encontraron dos isómeros de luteína (*all-trans*- y 9-*cis*-; 320,5 ± 25,7 µg/g), tres isómeros de β-caroteno (*all-trans*-, 13-*cis*- y 9-*cis*-; 229,3 ± 16,3 µg/g), dos isómeros de clorofila b (b y b´; 765,6 ± 80,9 µg/g), dos isómeros de feofitina (b y a; 392,1 ± 33,8 µg/g) y un isómero de clorofila a (207,0 ± 51,7 µg/g). El método desarrollado permitirá el análisis de alto número de muestras.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Efecto de la presión transmembranal sobre la composición y propiedades del retenido de microfiltración tangencial de leche bovina

Nury A. Manosalva [a], **Laura P. Joya** [a] **y Angélica M. García** [a,*]

[a] *Grupo de investigación en Química y Tecnología de Alimentos, GIQTA, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, UPTC, Facultad de Ciencias, Escuela de Química*
**Autores de correspondencia: angela.garciatorres@uptc.edu.co*

Palabras Claves: Leche; Microfiltración tangencial; Retenido; Permeado; Queso.

La microfiltración tangencial de leche es una innovadora y reciente técnica de separación por membranas para la fabricación de queso, en razón a la adecuada higienización de la materia prima mediada por la reducción y/o eliminación tanto de material sólido como de contenido microbiano indeseable [1]. Este mecanismo cuenta con un sistema de membrana semipermeable cuyo tamaño de poro oscila entre los 10- 0,1 µm. El efecto de la presión transmembranal sobre la solución a microfiltrar, permite que el fluido de alimentación corra en paralelo a la superficie mecánica; generando así tanto un "permeado" (corriente purificada con alto contenido de caseína y por ende, ideal para la fabricación de queso), como un "retenido" o "concentrado" que son las partículas que, por su mayor tamaño, quedan atrapadas en la corriente que se dirige de forma tangencial a la superficie membranal y son dispuestas como residuo del proceso. Este retenido, carece de estudios composicionales, nutricionales e incluso de su potencial impacto comercial como subproducto lácteo [2-3].

Para tal propósito, se realizó la obtención del retenido de leche fresca bovina mediado por la variación cuatro presiones transmembranales (0,6- 1,0- 1,4- 1,8 Bar), con el objetivo de evaluar las diferencias entre las condiciones de presurización al fluido dispuesto. A cada retenido se le realizaron los análisis bromatológicos que incluyen la determinación de los contenidos totales de grasa, proteína, lactosa, determinación cualitativa de peroxidasas e índice de peróxido en grasa. Análisis fisicoquímicos de conductividad, cenizas, humedad, sólidos totales, calcio, caseína y microscopia electrónica de barrido. De igual forma análisis microbiológicos de recuento de *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli* y coliformes totales. Demostrando de esta manera, que el efecto de la presión transmembranal incide directamente sobre los contenidos grasos, comportamiento enzimático e inocuidad microbiana en la composición del retenido.

A partir de los resultados obtenidos, se evidenció el posible uso del retenido resultante de la microfiltración tangencial de leche fresca bovina, como suplemento para diferentes productos alimenticios; ya que este mal llamado desecho en la industria quesera, contiene diferentes propiedades y composición que lo hacen viable para tal fin.

[1] K. G. Usgame Fagua, «Efecto de la tecnología de producción sobre la especifidad del sistema lipolítico, propiedades organolépticas y composición lipídica en el queso Paipa,» pp. 18-32, 2021.
[2] Z. Li , D. Liu, S. Xu, W. Zhang, Y. Hemar, J. M. Regenstein y P. Zhou , «Effects of pasteurization, microfiltration, and ultraviolet-c treatments on microorganisms and bioactive proteins in bovine skim milk,» *Food Bioscience*, vol. 43, nº 1-6, p. 7, 2021.
[3] P. Kumar, N. Sharma, R. Ranjan, S. Kumar, Z. F. Bhat y K. D. Jeong, «Perspective of Membrane Technology in Dairy Industry: A Review,» *Asian-Australas J Anim Sci*, vol. 26, nº 9, p. 1347–1358, 2013.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-109-P ***CARACTERIZACIÓN DE LAS PROPIEDADES FISICOQUÍMICAS Y MECÁNICAS DE FIBRAS LIGNOCELULÓSICAS DE PALMA DE IRACA (CARLUDOVICA PALMATA) CON POTENCIAL USO EN LA PRODUCCIÓN DE PAPEL ARTESANAL.***

Caracterización de las Propiedades Fisicoquímicas y Mecánicas de Fibras Lignocelulósicas de Palma de Iraca (*Carludovica palmata*) con Potencial uso en la Producción de Papel Artesanal.

Daniela B Mora; *[a] Juan, C Zambrano [a].

[a] *Grupo de Investigación de Bioquímica-.Estudios Genéticos BIOGEN, Universidad de Nariño. Colombia*

* *Autor de correspondencia: danimora@udenar.edu.co*

Palabras Claves: Iraca; papel artesanal; propiedades fisicoquímicas; propiedades mecánicas; celulosa

La palma de iraca Carludovica palmata (Ruiz & Pavon), también conocida como jipijapa, es una especie perteneciente a la familia Cyclanthaceae. Su uso principal radica en la elaboración de artesanías como sombreros, bolsos, entre otros. Dado que las fibras vegetales son fundamentales en el proceso de producción de papeles, es importante estudiar nuevas opciones de materiales vegetales no maderables que puedan ser usadas para tal fin. El objetivo principal de este trabajo fue evaluar las propiedades fisicoquímicas y mecánicas de 4 tipos de fibras obtenidas del proceso de producción de paja toquilla, y su uso en la producción de papel artesanal. Las fibras evaluadas fueron: Vena Verde (VV), vena amarilla (VA), vena corazón (VA) y paja toquilla (PT). Para cada una se realizaron las siguientes caracterizaciones: FTIR, porcentajes de extractivos (TAPPI 264 cm-97); celulosa (Kurschner & Hoffer), lignina (TAPPI T 222 os-98), hemicelulosa (Jayme-wise); cenizas (TAPPI T 15 os-58) y humedad. Para las propiedades mecánicas se evaluó resistencia a la tracción, módulo de Young y porcentaje de elongación (ASTMD-3822-07). A nivel general, se obtuvo tanto para las propiedades fisicoquímicas y mecánicas que las fibras mantuvieron el siguiente orden VV>VA>VC>PT, esto debido a que existe una relación entre las propiedades químicas y mecánicas, por tanto a mayor resistencia a la tracción y módulo de Young, mayor será el contenido de celulosa y lignina; además que PT presentó los valores más bajos es decir, es menos rígida y resistente por cual solo ésta es utilizada para la elaboración de artesanías. Así, las 4 fibras presentaron altos porcentajes de celulosa entre 44.02% y 51.02%, por tanto, son aptas para la obtención de pasta de celulosa utilizando el método alcalino con NaOH 25% y blanqueamiento de la pasta con H_2O_2 50%. Se obtuvieron porcentajes de rendimientos de: VV (35.65%), VA (32.45%), VC (30.98%) y PT (28,78 %), es decir, el método utilizado garantiza una buena recuperación de pasta de celulosa y así formar láminas de papel de tipo artesanal, por lo que se sugiere, que la fibra obtenida de la palma de iraca, pueda ser usada como materia prima en la industria del papel.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-110-P CARACTERIZACIÓN DE PARÁMETROS FISICOQUÍMICOS, MECÁNICOS Y BIOMÉTRICOS DE FIBRA DE PALMA DE IRACA OBTENIDA DE CUATRO MATERIALES VEGETALES DEL GÉNERO CARLUDOVICA

Caracterización de Parámetros Fisicoquímicos, Mecánicos y Biométricos de Fibra de Palma de Iraca Obtenida de Cuatro Materiales Vegetales del Género Carludovica

Diana C Pabón*[a], Juan C Zambrano[a]

[a] *Grupo de Investigación de Bioquímica - Estudios Genéticos BIOGEN, Universidad de Nariño, Colombia*
** Autor de correspondencia: dicaro360@gmail.com*

Palabras Claves: fibra vegetal; celulosa; paja toquilla; artesanía

La paja toquilla obtenida de la palma de iraca, tiene un gran potencial económico, ya que es usada como fuente de fibras naturales para elaboración de diversos tipos de artesanías, por lo que resulta necesario conocer las propiedades tanto de la fibra de uso comercial, como de las fibras no comerciales obtenidas de material vegetal silvestre, que permitan potencializar sus aplicaciones comerciales y logre ser posicionada productivamente. En este contexto, el objetivo de este estudio fue evaluar las propiedades biométricas, fisicoquímicas y mecánicas de fibras de palma de iraca de 4 materiales vegetales: Linares (LIN), Medellín (MED), Mocoa (MOC) y Orito (ORI) a los cuales se realizó las siguientes caracterizaciones: propiedades biométricas, FT-IR, composición química según las Normas TAPPI y método de Jayme-Wise, humedad, densidad y propiedades mecánicas según la Norma ASTM D3822-07. El material vegetal MED presentó buenas características biométricas en cuanto a grosor, número de nervaduras, ancho foliolo, número de fibras y ORI en cuanto a longitud de cogollo verde, longitud de fibras y peso cogollo seco; lo anterior respecto al material vegetal LIN, que actualmente es usado como cultivo comercial. La caracterización fisicoquímica de las fibras mostró que el contenido de extractivos, celulosa, hemicelulosa, lignina, cenizas, humedad y densidad en cada material vegetal son comparables a los reportados en la literatura para otras fibras naturales. El material vegetal MOC presentó un alto contenido de celulosa (50,27 ± 1,35%) proporcional a una alta resistencia a la tracción (64,35 ± 12,49 MPa), ORI presentó un alto contenido de lignina (20,04 ± 1,47 %) y hemicelulosa (15,41 ± 1,58%) lo que influyó en un aumento de la elongación (6,90 ± 1,32%) similar al obtenido para MED (6,87 ± 2,60%), mientras que LIN tuvo bajo desempeño en las propiedades indicadas anteriormente; sin embargo, registró un alto Módulo de Young (1789,74 ± 469,11 MPa) lo que indicaría que las fibras son más rígidas y menos elásticas. Los resultados permitieron establecer que el material vegetal MOC, ORI y MED presentaron propiedades significativamente superiores con respecto a LIN; por tanto, se sugiere también usarlos como materia prima en la agroindustria artesanal.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Caracterización Fisicoquímica de Harina Alternativa de Noni (*Morinda citrifolia L.)*

Nahomy Cortés [a*], María C. Ruíz [a], Clara M. Mejía [a], Alba L. Duque [a]

[a] *GI: Agroindustria de Frutas Tropicales, Universidad del Quindío, Colombia*
* *ncortesl@uqvirtual.edu.co*

Palabras Claves: Harina de noni; secado; fruto climatérico; radicales libres.

El Noni (*Morinda citrifolia L.)* es un fruto exótico, de fácil cultivo en el territorio colombiano y con múltiples propiedades medicinales atribuidas desde la antigüedad, pero a pesar de esto, su consumo es bajo a causa de su desagradable aroma y características climatéricas que generan importantes pérdidas poscosecha. Teniendo en cuenta lo anterior, el objetivo de este estudio fue obtener harina alternativa de noni y caracterizarla fisicoquímicamente. Para ello, se secó el fruto verde brillante usando un horno de recirculación de aire caliente (SAC) a 50ºC, luego se realizó una molienda y finalmente un tamizado hasta un tamaño de partícula de 100□m. Se evaluaron las propiedades de la harina obteniéndose como resultados los valores presentados en la tabla 1.

Tabla 1. Caracterización fisicoquímica de harina alternativa de Noni (*Morinda citrifolia L.) (Autores)*

Parámetro	Resultado
Humedad (%)	5,91±0,02
Cenizas (%)	5,44±0,01
Proteína (%)	10,90±0,01
Lípidos (%)	2,30±0,01
Fibra (%)	17,93±0,04
Carbohidratos totales (g/100 g)	84,61±0,09
Valor calórico (Kcal)	366,09±0,00
Acidez Titulable (%)	0,16±0,01
°Brix	3,93±0,06
Actividad de agua (a_w)	0,37±0,00
Vitamina C (mg/100 g)	228,96±0,00
% Inhibición del radical DPPH	76,41±0,00
Color	a*= 0,90±0,00 b*= 15,50±0,06 L*= 44,70±0,05

El método de secado SAC es adecuado para la obtención de la harina de noni, teniendo en cuenta que la diminución en la capacidad antioxidante (26,6%) y vitamina C (35,7%) no es significativa con respecto al fruto fresco. En la caracterización fisicoquímica de la harina de noni, se destaca el contenido de proteína (10,90%), fibra (17,93%) y su bajo valor de lípidos (2,30%). Además, su consumo contribuiría a contrarrestar el estrés oxidativo y proteger contra el daño celular ocasionado por los radicales libres considerando el alto porcentaje de inhibición del radical DPPH (76,41%), lo que posiciona la harina como una opción prometedora en la producción de alimentos. Por otra parte, esta harina representa una alternativa para reemplazar las harinas convencionales como la de trigo, lo cual resulta beneficioso en la elaboración de productos libres de gluten.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-112-P ***COMPOSICIÓN QUÍMICA Y PROPIEDADES ANTIOXIDANTES DE EXTRACTOS DE DIOSCOREA ALATA, COLOCASIA ESCULENTA, MANIHOT ESCULENTA E IPOMOEA BATATAS***

Composición química y propiedades antioxidantes de extractos de *Dioscorea alata, Colocasia esculenta, Manihot esculenta* e *Ipomoea batatas*

Daniela P Tapia Rojas[a], Yeraldine Acosta Buelvas[a], Karol M Romero Villareal[a], José H Aguilar Castro[a], Elena Stashenko[b] and Geovanna Tafurt-García[a*]

[a] *Escuela de Pregrados, Dirección Académica, Universidad Nacional de Colombia, sede de La Paz, Cesar, Colombia.*
[b] *Escuela de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia*
Autor de correspondencia: gtafurg@unal.edu.co

Palabras clave: polifenoles; saponinas; emulsificantes; antioxidantes

Yuca (*Manihot esculenta*), ñame (*Dioscorea* spp), batata (*Ipomoea batatas*) y malanga (*Colocasia esculenta*), se encuentran entre los tubérculos empleados como alimento en regiones tropicales de todo el mundo. Los tubérculos son reconocidos por su gran aporte de energía y como fuente de harinas, almidones, proteínas, minerales, vitaminas y metabolitos secundarios. Los flavonoides y las saponinas se encuentran entre los metabolitos secundarios presentes en tubérculos, y representan un área de investigación importante debido a su relación con diferentes aplicaciones biotecnológicas y patologías. Por lo anterior, el objetivo de este trabajo fue establecer de manera preliminar la presencia de saponinas y fenoles en extractos provenientes de pulpas y cáscaras de ñame, malanga, yuca y batata, y comparar las propiedades espectroscópicas y antioxidantes derivadas. La detección de azúcares, almidones, fenoles y saponinas se realizó mediante tamizaje fitoquímico. Las características estructurales generales se determinaron mediante análisis espectral IR y UV. La actividad antioxidante de los extractos se determinó mediante la Capacidad de Absorción de Radicales Libres de Oxígeno (ORAC). Se demostró la presencia de saponinas esteroidales y triterpénicas. El análisis de los espectros IR evidenció vibraciones de alargamiento de enlaces O-H, C-H, C=C, C-O, C-O-C, C=O, características de fenoles y saponinas. Los espectros UV mostraron las transiciones electrónicas correspondientes con transiciones $\square \rightarrow \square^*$ y $n \rightarrow \square^*$. Las señales espectrales de las cáscaras evidenciaron un mayor número de electrones tipo pi (C=C y/o C=O), posiblemente conjugados. Los extractos de cáscaras presentaron mayor ORAC en relación con pulpas. Ningún extracto superó la ORAC del antioxidante de referencia. En conclusión, se comprobó la presencia de grupos funcionales y funciones orgánicas correspondientes con saponinas y fenoles en extractos de cáscaras y pulpas provenientes de *ñame, malanga, batata y yuca*. Se determinó que la batata morada, presentó la mayor actividad antioxidante. Asimismo, para todos los tubérculos, los extractos de cáscaras fueron antioxidantes más activos que las pulpas. Los resultados encontrados son importantes para el aprovechamiento preliminar de las cáscaras de estos tubérculos en la elaboración de productos de valor agregado.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-113-P ***ESTRATEGIAS DE MICROENCAPSULACIÓN PARA LA PRESERVACIÓN Y CONTROL DE LA CALIDAD DEL ESPERMA EN LA ESPECIE BOVINA***

Estrategias de Microencapsulación para la Preservación y Control de la Calidad del Esperma en la Especie Bovina

Valentina Martínez*[1]; Cristian C. Villa[2]; Diana Blach[2]

[1]*Estudiante de Química. Facultad de ciencias básicas y tecnologías. Universidad del Quindío. Grupo GIFAC*
[2]*Docente programa de Química. Facultad de ciencias básicas y tecnologías. Universidad del Quindío. Grupo GIFAC*

** Autor de correspondencia: valentina.martinezp@uqvirtual.edu.co*

Palabras clave: Bionanotecnología; microencapsulación; alginato de sodio, calidad espermática, preservación espermática.

En el proceso de inseminación artificial, la conservación por tiempo indeterminado del germoplasma masculino empleando crioconservación representa un mecanismo eficiente para la promoción y difusión de material genético de excelente calidad, sin embargo, es importante destacar que durante los procesos de congelación y descongelación los espermatozoides pueden sufrir daños en la membrana citoplasmática y mitocondrial alterando la función metabólica, y reduciendo así el número de células viables para el proceso. En este sentido, este trabajo ha propuesto la técnica de microencapsulación la cual se fundamenta en recubrir las células espermáticas con una membrana bipolimérica semipermeable, como una alternativa a los métodos convencionales de conservación, a causa de que se ha demostrado que contribuye a mantener la motilidad y la viabilidad espermática por tiempos prolongados. El objetivo de este trabajo fue desarrollar un método de microencapsulación espermática para proteger y conservar de una forma más eficiente espermatozoides de la especie bovina. Para la obtención de las microcápsulas se evaluaron diferentes concentraciones de alginato de sodio y de cloruro de bario con el fin de lograr mejores rendimientos y estabilidad. Se establecieron las condiciones de encapsulación de las células espermáticas, y las muestras se trataron mediante un proceso de congelación lenta para su posterior almacenamiento usando criotubos y nitrógeno líquido, a -196 ºC. Se evaluó la motilidad post-descongelación, morfología y número de espermatozoides con motilidad progresiva. Los resultados mostraron que el alginato en bajas concentraciones produce solamente láminas, para lograr obtener esferas se necesita de concentraciones de alginato por encima del 2%, se evidencio que este biopolímero debido a su capacidad gelificante que permite interactuar con cationes divalentes como el bario para formar matrices con las propiedades que permiten mantener las características morfológicas y funcionales de las células encapsuladas post-descongelación. El análisis de la varianza estimó que el uso de microencapsulación en procesos de crioconservación permite mantener sin diferencias significativas la viabilidad y la morfología de células espermáticas durante el almacenamiento en comparación a las células frescas.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-114-P ***OPTIMIZACIÓN NANOTECNOLÓGICA PARA POTENCIAR LA ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA DEL CITRAL FRENTE A LOS AGENTES INFECCIOSOS RESPONSABLES DE LA MASTITIS BOVINA SUBCLÍNICA***

Optimización nanotecnológica para potenciar la actividad antibacteriana del Citral frente a los agentes infecciosos responsables de la mastitis bovina subclínica.

Robinson A. García[1]*; Cristian Camilo Villa[2]; Diana Blach[2]

[1]Estudiante de Química. Facultad de ciencias básicas y tecnologías. Universidad del Quindío. Grupo GIFAC
[2]Docente programa de Química. Facultad de ciencias básicas y tecnologías. Universidad del Quindío. Grupo GIFAC*
Autor de correspondencia: robinsona.garciac@uqvirtual.edu.co

Palabras Claves: Nanoencapsulación, nanopartículas lipidicas, Mastitis bovina subclinica; Citral.

La mastitis bovina es una enfermedad muy común en los hatos lecheros, la cual es responsable de significativas pérdidas económicas para el productor ya que disminuye de forma considerable la producción de leche y la calidad de la misma. La mastitis puede ser causada por diversos factores, de modo que la enfermedad se puede presentar de distintas formas, una de las más comunes es la mastitis subclínica, en la cual la enfermedad se manifiesta sin aparentes cambios físicos en la ubre o en la calidad de la leche, sin embargo, si puede afectar el volumen de producción. Múltiples estudios al respecto han demostrado que la mastitis subclínica guarda una relación directa con la diseminación de ciertos tipos de bacterias; como el *Escherichia Coli* y *Staphylococcus aureus* al interior del conducto mamario, de modo que el control y la prevención de esta forma de la enfermedad está emparentado con las medidas asépticas antes, durante y posterior al ordeño. El objetivo del presente estudio es potenciar la actividad antimicrobiana de compuestos bioactivos a través del uso de estrategias nanotecnológicas como la encapsulación usando nanopartículas lipídicas; para ello, se empleó aceite de ricino hidrogenado como vehículo para la encapsulación del citral, utilizando como método de producción la ultrasonicación y homogenización en caliente. Se determinaron los parámetros óptimos de formación, propiedades fisicoquímicas, de estabilidad y microbiológicas de las microemulsiones obtenidas. Los resultados obtenidos evidencian la viabilidad del proceso de vehiculización del Citral, se identificaron los parámetros más relevantes en el proceso de estabilidad y se determinaron las características fisicoquímicas del sistema que correlacionan con la actividad antimicrobiana encontrada para los análisis realizados sobre *Escherichia Coli* y *Staphylococcus aureus* como bacterias modelo.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-229-P ***CARACTERIZACIÓN FISICOQUÍMICA DEL ALMIDÓN DE BORE CULTIVADO EN EL DEPARTAMENTO DEL QUINDÍO***

Caracterización Fisicoquímica del Almidón de Bore Cultivado en el Departamento del Quindío

Daniela Torres [a*], **Alba L. Duque** [a], **Clara M. Mejía** [a]

[a] *Agroindustria de Frutas Tropicales, Universidad del Quindío, Colombia*
** Autor de correspondencia: dtorresa_1@uqvirtual.edu.co*

Palabras Claves: bore; extracción; almidón; caracterización fisicoquímica.

El almidón es ampliamente utilizado en la industria y su demanda es cada vez mayor. En Colombia existen cultivos poco explorados como el bore, que poseen un gran potencial para su obtención. Es así, como el objetivo de esta investigación es caracterizar fisicoquímicamente el almidón de bore cultivado en el departamento del Quindío. Para ello, se extrajo el almidón en base húmeda, se secó en horno de recirculación de aire caliente a 40 °C, se molió y luego se caracterizó fisicoquímicamente. Los resultados del análisis se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1. Caracterización fisicoquímica del almidón de bore

Parámetros	Composición
Humedad (%)	14,48 ± 0,04
Cenizas (%)	0,21 ± 0,03
Proteína (%)	0,06 ± 0,00
Lípidos (%)	0,38 ± 0,01
Fibra (%)	0,00 ± 0,00
Carbohidratos totales (%)	84,86 ± 0,00
Fósforo (%)	0,0032 ± 0,0008

Teniendo en cuenta los valores obtenidos, el bajo contenido de lípidos (0,38%) evita olor y sabor desagradable durante el almacenamiento del almidón; además, el contenido de humedad (14,48%) prolonga su periodo de vida útil. Por su parte, el proceso de extracción fue eficiente debido a la baja concentración de proteínas (0,06%), cenizas (0,21 %) y fibra (0,00 %), ya que se encuentran dentro de los parámetros establecidos para almidones comerciales.

El gránulo de almidón extraído del bore presenta una forma poligonal e irregular con un tamaño de 1,15-3,90 µm y está compuesto por 11,44 % de amilosa y 88,56 % de amilopectina. Las características presentadas, indican que el bore representa una alternativa para la obtención de almidón, el cual muestra una alta calidad y propiedades deseables en diferentes aplicaciones.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-260-P ***INFLUENCIA DEL pH EN LA OBTENCIÓN DEL JARABE DE MUCÍLAGO DE CACAO.***

Influencia del pH en la obtención del jarabe de mucílago de cacao.

Paula A. Ruiz[a], Maria A. Calderon[a], Andrés F. Ramírez[a], Marianny Y. Combariza[a], Debora A. Nabarlatz[b]*.

[a]GIFTEX, Escuela de Química, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Santander, Colombia.
[b]INTERFASE, Escuela de Ingeniería Química, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Santander, Colombia.

** Autor de correspondencia: dnabarla@uis.edu.co*

Palabras Claves: Exudado de mucílago de cacao; Jarabe de cacao; Rotoevaporador, pH, viscosidad.

Esta investigación se enfoca en la producción de Jarabe de Cacao (JC) a partir del Exudado de Mucílago de Cacao (EMC) mediante rotoevaporación, valorizando así este residuo y transformándolo en un producto que pueda ser utilizado como endulzante alimenticio. El proceso de concentración del EMC se realizó a pH 3.6 y 5.6, mediante rotoevaporación a 70°C, 80 rpm y presión de vacío de 50 mbar. La concentración del EMC se siguió midiendo los °Brix con un refractómetro digital; el proceso se detuvo al alcanzar 70° Brix. Se analizaron las concentraciones de glucosa, sacarosa y fructosa en los jarabes de cacao a través de cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) con detector de índice de refracción, en un cromatógrafo de inyección automática, equipado con una columna SUPELCOGEL C610-H (PS/DVB, 30 cm x7.8 mm, tamaño de partícula 9 µm) a 30 ºC. Asimismo, se midió el esfuerzo de corte y viscosidad dinámica de los jarabes mediante un reómetro MCR 302 Anton, realizando un barrido de viscosidad con tasa de corte de 0.1 a 100 s^{-1}.

Las muestras de JC obtenido a pH 3.6 contienen 341.40 ± 7.67 g L^{-1} de sacarosa, 439.02 ± 6.47 g L^{-1} de glucosa y 450.73 ± 6.92 g L^{-1} de fructosa. Las muestras de JC obtenido a pH 5.6 contienen 332.13 ± 14.89 g L^{-1} de sacarosa, 410.54 ± 13.25 g L^{-1} de glucosa y 420.95± 13.89 g L^{-1} de fructosa.

El pH no afectó significativamente la concentración de carbohidratos en el JC, pero sí se observaron diferencias en el comportamiento reológico de los jarabes. Al aplicar una fuerza, la resistencia al flujo en el JC obtenido a partir de EMC a pH=3.6 disminuyó más rápido en comparación con el JC obtenido a partir de EMC a pH=5.6, presentando en los dos casos un comportamiento similar a un fluido pseudoplástico. Finalmente, el jarabe de cacao JC es un producto natural a partir de residuos del cacao, que puede competir con los endulzantes comerciales disponibles en el mercado.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Edulcorantes Líquidos a partir de Exudado de Mucílago de Cacao por Evaporación

Maria A. Calderon[a], Paula A. Ruiz[a], Andrés F. Ramírez[a], Marianny Y. Combariza[a], Debora A. Nabarlatz[b]*.

[a]GIFTEX, Escuela de Química Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Santander, Colombia.
[b]INTERFASE, Escuela de Ingeniería Química, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Santander, Colombia.

** Autor de correspondencia: dnabarla@uis.edu.co*

Palabras claves: Exudado de mucílago de cacao; evaporación; edulcorantes; HPLC.

El exudado del mucílago de cacao (EMC) es un subproducto del procesamiento de frutos de cacao, el cual representa hasta el 4,13 ± 0,80 % en peso de la biomasa del fruto del cacao. El EMC contiene hasta un 15% en peso de azúcares simples y ácidos orgánicos, por lo que tiene un gran potencial como endulzante en sustitución del azúcar de mesa.

Se evaluó el proceso de concentración del EMC utilizando una columna de destilación giratoria de 30 platos teóricos a escala piloto. El EMC fue alcalinizado a un pH entre 5.0 a 5.5 y posteriormente filtrado para reducir impurezas. Las pruebas de destilación se realizaron a diferentes presiones (70, 372 y 674 Torr) y velocidades de calentamiento (0.5, 1 y 1.5 °C/min), utilizando un diseño de experimentos central compuesto con 5 réplicas en el centro. La concentración de sólidos se determinó mediante el uso de un refractómetro digital, mientras que la concentración de carbohidratos se determinó mediante cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) en un cromatógrafo de inyección automática con detector de índice de refracción, equipado con una columna SUPELCOGEL C610-H (PS/DVB, longitud 30 cm, diámetro 7.8 mm, tamaño de partícula 9 µm) a 30 ºC. Las separaciones fueron llevadas a cabo en modo isocrático con fase móvil de solución acuosa (0.1% ácido fosfórico - H3PO4) utilizando fructosa, glucosa y sacarosa como estándares.

Se encontró que la velocidad de calentamiento y la presión a las condiciones estudiadas no afectan significativamente la concentración de carbohidratos, donde a una presión de 372 [Torr] y una velocidad de calentamiento de 1,5 [°C/min] se obtuvo una concentración final de sólidos de 70 ± 0,9 °Brix. A estas condiciones el EMC concentrado tiene una concentración de 263,51 ± 2,04 g L^{-1} de sacarosa, 355,88 ± 6,120g L^{-1} de glucosa y 377,99 ± 3,28 g L^{-1} de fructosa, además de presentar un color similar a la miel, por lo que puede ser utilizado como edulcorante en la industria alimentaria.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-274-P ***BÚSQUEDA RACIONAL DE COMPUESTOS VOLÁTILES DE ORIGEN NATURAL COMO POSIBLES AGENTES DE REEMPLAZO AL CLORPIRIFOS***

Búsqueda Racional de Compuestos Volátiles de Origen Natural como Posibles Agentes de Reemplazo al Clorpirifos

Angie D. Torres-Garcia[a], Daniel F. Victoria-Muñoz[b], Johana Ardila-parrado[a], Erika A. Plazas[c], Norberto Sánchez Cruz[d], Cesar A. Sierra[a*]

[a] Grupo *de investigación en Macromoléculas, Departamento de Química, Facultad de ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Colombia;* [b]*Institute of Pharmaceutical and Medicinal Chemistry, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, Germany;* [c]*Chemistry Department, Acadia University, Canadá;* [d]*Instituto de química, Unidad Merida, Universidad Nacional Autónoma de México, México.*

angtorresga@unal.edu.co **casierraa@unal.edu.co*

Palabras clave: compuestos volátiles; cribado virtual; insecticida; acetilcolinesterasa.

Resumen

El banano y el plátano ocupan un gran renglón de la economía colombiana debido a su alta tasa de exportación. Sin embargo, en los últimos años se ha observado un estancamiento en la dinámica evolutiva del mercado debido a los altos costos de producción, baja tecnificación, falta de competitividad y las restricciones en el uso de insecticidas. Este aspecto se ve reflejado en el clorpirifos, un insecticida poco selectivo y con alta residualidad, que recientemente fue prohibido por múltiples agencias gubernamentales. En este sentido, en este estudio se realizó un cribado virtual de compuestos de origen natural con posible volatilidad y su evaluación biológica *in vitro* frente acetilcolinesterasa (AChE), como potenciales agentes de reemplazo al clorpirifos. La metodología comprendió la selección de compuestos con posible volatilidad de la base de datos COCONUT, los cuales fueron acoplados frente a AChE de *Drosophila melanogaster*, modelo biológico de interés en el control de plagas. Aquellos compuestos que tuvieron patrones de interacción similar a un inhibidor conocido (tacrina) fueron escogidos como posibles candidatos. Por último, a las moléculas que cumplieron los criterios de volatilidad, factibilidad sintética y precio en el mercado se evaluó su actividad in vitro. Como resultado 119749 compuestos fueron acoplados encontrando que 90 poseen patrones de interacción con una similitud mayor al 90%. 12 compuestos cumplieron con los criterios base y uno de estos presento un porcentaje de inhibición superior al 90%, siendo un potencial candidato insecticida a optimizar.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-286-P CARACTERIZACIÓN QUÍMICA DE DOS ESPECIES AMAZÓNICAS UMARI (PORAQUEIBA SERÍCEA TUL) Y UVA CAIMARONA (POUROUMA CECROPIIFOLIA) COMO PRODUCTOS DE INTERÉS ECONÓMICO EN LA AMAZONÍA COLOMBINA

Caracterización Química de Dos Especies Amazónicas Umarí (*Poraqueiba serícea Tul*) y Uva Caimarona (*Pourouma cecropiifolia*) Como Productos de Interés Económico en la Amazonía Colombina

Luisa L. Orduz-Díaz[a], Diana C. Guerrero [a], Marcela P. Carrillo [a], Juliana E.C, Cardona - Jaramillo [a]*

[a] *Instituto Amazónico de Investigaciones Científicas - Sinchi, Colombia*

* *Autor de correspondencia:* jcardona@sinchi.org.co

Palabras Claves: Amazonía; Umarí; Aceites; Carotenoides**,** Uva Caimarona, antocianinas

La Amazonia colombiana se distingue por su amplia variedad de especies vegetales , entre las cuales se encuentran muchas que son poco conocidas y que solo son consumidas en la región como fuente de alimento. Entre estas, se encuentra el Umarí (*Poraqueiba serícea* Tul), también conocido como humarí, guacure, yure o teechi, pertenece a la familia Icacinaceae y es originaria de la Amazonia brasilera, colombiana y ecuatoriana. Su fruto es una drupa obovoide de cáscara delgada, lisa, lustrosa, de color amarillo, negro, rojo o verdoso dependiendo del estado de maduración y del morfotipo; mesocarpio comestible con textura grasa, de color amarillo. Por otro lado, la uva amazónica o uva caimarona (*Pourouma cecropiifolia*), conocida como uva de monte, uvilla, caimarón, uva de mata, mapati, puruma, imbauba de vino, pertenece a la familia Cecropiaceae y destaca por ser un fruto de sabor dulce consumido en fresco o en productos como jaleas o vinos; también, se usan sus semillas como sustitutos del café.

Se realizó una caracterización bromatológica, cuantificación de azúcares, ácidos orgánicos, antocianinas, carotenoides, evaluación de perfil lipídico del fruto de Umarí y Uva Caimarona y de los productos obtenidos a partir de estos. Se encontró que el Umarí contiene más del 15% de lípidos en su mesocarpio y exocarpo a partir de los cuales se obtuvo un aceite anaranjado por prensado expeller e hidráulico que al ser analizado mostró un contenido superior al 78% de ácido oleico y una concentración de 105.85 ± 15.85 mg de β-caroteno/100 g de aceite, siendo este caroteno el predominante y responsable del color. Adicionalmente, se determinó la presencia de α-tocorferol, uno de los isómeros de la vitamina E, en concentración de 4.56 ± 0.01 mg/ 100 g de aceite, reconocido por su actividad antioxidante.

En la uva caimarona se encontró un alto contenido de carbohidratos, donde se resalta la fibra dietaría 39.6% y 13.5% en el exocarpo y mesocarpio respectivamente. Por otro lado, las semillas tienen un 11% de lípidos que contienen ácidos grasos esenciales y vitamina C en altas concentraciones (5066.03 ± 1471.13 mg/100 g).

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Evaluación de las Características Tecno-funcionales de Harinas de Dos Variedades de Chontaduro (*Bactris gasipae*)

Yuberley Amaya-Vélez[a], Diego F. Roa-Acosta[b], Lina M. Agudelo-Laverde[a*]

[a] *Universidad del Quindío, Facultad de Ciencias Agroindustriales, Grupo de Investigación en Procesos Agroindustriales. Colombia*
Universidad del Cauca, Facultad de Ciencias Agrarias. Colombia
**Autor de correspondencia: lmagudelo@uniquindio.edu.co*

Palabras Claves: Reología; FTIR; microscopía, microondas; secado convectivo.

Las tendencias de consumo actuales han llevado a incrementar los estudios y desarrollos de nuevos productos alimenticios que contribuyan con aportes nutricionales adicionales al sabor y precio. En particular, en Colombia y el mundo se ha evidenciado un aumento de personas con intolerancia al gluten y enfermedad celíaca, que buscan productos que satisfagan sus necesidades. El objetivo de este trabajo fue analizar las propiedades tecno-funcionales de harinas de chontaduro de las variedades rojo y amarillo obtenidas por secado por microondas usando como control el secado convectivo. Se analizó la capacidad, absorción de agua, índice de solubilidad y poder de hinchamiento. Se evaluaron las propiedades estructurales mediante espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier y microscopía electrónica de barrido. Adicionalmente, se realizó la caracterización reológica a través del perfil de flujo de dispersiones de harina en agua (8, 16 y 20 g/mL) y sus curvas de empastamiento. Los resultados mostraron que todas las harinas independientemente de la variedad presentan valores similares de capacidad de absorción de agua y poder de hinchamiento, con pequeñas diferencias en el índice de solubilidad siendo afectada por el tipo de secado empleado, con mayores valores durante el secado por microondas. El análisis espectroscópico mostró el efecto del secado sobre las longitudes de onda de 3325, 2950, 2890, 1710 y 1645 cm^{-1}. Lo cual se confirma a través de las imágenes de microscopía en la cual se observó un daño en la estructura atribuida a la energía de mayor intensidad del secado por microondas. Las dispersiones de harinas a diferentes concentraciones presentaron un comportamiento dilatante (n>1), con umbral de fluencia antes y después del calentamiento. A altas concentraciones se formaron geles que podrían ser utilizados en la industria alimentaria. Estos resultados indican que las harinas de chontaduro constituyen una alternativa libre de gluten para el desarrollo de productos similares a molinería, panificados y repostería con características nutricionales de interés.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Cinética de Inactivación de Pectinmetilesterasa en Frutos de mora *(Rubus glaucus)*

Dolffi Rodríguez [a] ***; Jairo E, Granados**[b]

[a]**Universidad Nacional abierta y a distancia-UNAD, Escuela de Ciencias Básicas e ingenierías-**ECBTI, Bogotá, Colombia;
[b]Departamento de Química, Universidad de Cundinamarca, Facultad de Ciencias Agropecuarias, GRIPEPZ, Fusagasugá, Colombia

Autor de correspondencia: dolffy.rodriguez@unad.edu.co

Palabras Claves: enzyme inhibitors; Kinetic enzyme; Calcium chloride; Cellular wall

Introducción: Frutos de mora (*Rubus glaucus*) son blandos, altamente perecederos y de poca dureza (Candan, 2014) como resultado de la intensa actividad enzimática de Pectinmetilesterasa (PME) y Poligalacturonasa en la pared celular, esto implica grandes pérdidas económicas en la poscosecha del fruto. La investigación ha demostrado que las PME están involucradas, directa e indirectamente, en diversos procesos fisiológicos asociados con el desarrollo vegetativo y reproductivo de las plantas (Pelloux, J, et al, 2018) **Objetivo**: Este investigación buscó caracterizar fisicoquímicamente frutos de *Rubus glaucus*, de dos índices de madurez, así como la cinética de inactivación de Pectinmetilesterasa; además se evaluó la efectividad de 2 inhibidores: Ácido Ascórbico y Cloruro de Calcio. al 1%, 2% y 4%, respectivamente. **Metodología**: PME se extrajo según procedimiento propuesto por Carabalí, et al, (2009), la actividad enzimática se determinó mediante técnica espectrofotométrica de Hagerman y Austin, (1986). **Resultados**: Las diferencias estadísticas de promedios se evaluaron mediante análisis de varianza unidireccional y prueba Duncan; También se efectuó análisis de correlación entre las variables estudiadas, utilizando programa SAS (2018); Acorde a la tabla 1, se aprecia que la constante de inactivación **(K_i) de $CaCl_2$-4%**, superó significativamente (P<0.050) a los demás tratamientos, lo cual causó una disminución significativa (P<0.050) en el tiempo de reducción decimal (D), incrementando la efectividad del inhibidor.

Tabla 1: Parámetros cinéticos para inactivación de PME, proveniente de frutos *Rubus glaucus*, en presencia de dos inhibidores químicos a Temperatura 37ºC

Tratamientos	K_i (min^{-1})	D (min)
Acido ascórbico-2%	0.1465	15.72
Acido ascórbico-4%	0.1087	21.19
$CaCl_2$-2%	0.2024	11.38
$CaCl_2$-4%	0.3507	6.57

K_i: constante de inactivación, **D**: Reducción de tiempo decimal; (Condiciones del ensayo: Buffer fosfato salino 0.020M y solución Tritón X-100: 0.100%, T: 37ºC, pH: 7.0)

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-314-P ***INTERACCIONES MOLECULARES CLAVE PARA LA ACTIVIDAD AGONISTA Y ANTAGONISTA DEL RECEPTOR DE OCTOPAMINA DE LA D. MELANOGASTER***

Interacciones Moleculares Clave para la Actividad Agonista y Antagonista del Receptor de Octopamina de la *D. melanogaster*

Andrés F. Ortiz-Sarmiento [a], Daniel F. Victoria-Muñoz [b], Angie D. Torres-Garcia [a], Erika A. Plazas [c], Cesar A. Sierra [a*]

[a] *Grupo de investigación en Macromoléculas, Departamento de Química, Facultad de ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Colombia*
[b] *Institute of Pharmaceutical and Medicinal Chemistry, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, Alemania*
[c] *Chemistry Department, Acadia University, Canada.*
*casierraa@unal.edu.co

Palabras clave: Octopamina; receptor de octopamina; agonista; antagonista; pesticida.

Resumen:
Los receptores de octopamina han emergido como blancos biológicos prometedores en la búsqueda de nuevos pesticidas, debido a su potencial para exhibir alta especificidad hacia los invertebrados [1]. En el presente estudio se caracterizaron las interacciones claves entre el ligando natural (agonista) y un antagonista conocido con el receptor de octopamina de la *Drosophila melanogaster*, seleccionando así moléculas con un potencial efecto antagonista. Debido a la falta de una estructura cristalográfica, fueron realizados modelos tridimensionales de este receptor, empleando los siguientes servidores: Robetta, ITASSER y AlphaFold. Posteriormente, se seleccionó el modelo con las mejores métricas de calidad y se realizaron los acoplamientos moleculares con el ligando natural, el antagonista y moléculas con actividad desconocida, usando AutoDock Vina 1.2.4. A continuación, se compararon las interacciones de las moléculas desconocidas contra las del antagonista y se seleccionaron compuestos con patrones similares a este. Como resultado y en ausencia de estructuras cristalográficas de este receptor, se encontró un modelo tridimensional con un RMSD de 1.165 Å con respecto a la estructura cristalográfica con mayor porcentaje de identidad, lo que confirma su idoneidad. Se identificaron las interacciones relevantes entre el ligando endógeno, el antagonista conocido y este receptor, permitiéndonos obtener un análisis comparativo, entre ambos tipos de ligando, destacando diferencias y similitudes en sus interacciones. Finalmente, estos patrones se usaron para seleccionar entre las moléculas con actividad desconocida, aquellas con mayor potencial antagonista, siendo estos nuevos puntos de partida para pesticidas con acción en nuevos blancos.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-329-P ***CARACTERIZACIÓN PRELIMINAR DEL ACEITE DE COCO VIRGEN (HÍBRIDO DE LAS VARIEDADES ALTO CARIBE Y ENANO MALAYO) EN CÓRDOBA.***

Caracterización Preliminar Del Aceite De Coco Virgen (Híbrido De Las Variedades Alto Caribe Y Enano Malayo) En Córdoba.

Maria J. Lara [a, b]*, Arnulfo L. Aleman [a, c], Jorge A. Osorio [a, c], Guillermo S. Arrazola [a, c].

[a] *Grupo de investigación GIPAVE, Universidad de Córdoba, Colombia.*
[b] *Estudiante de maestría en Biotecnología, Universidad de Córdoba, Colombia.*
[c] *Docente, Universidad de Córdoba, Colombia.*

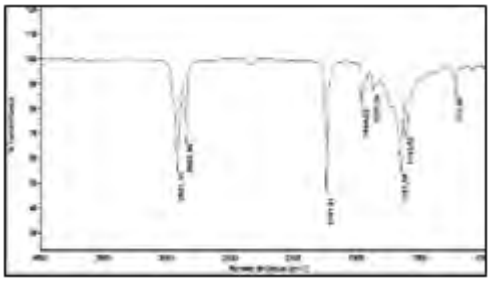
** Autor de correspondencia: mlarasuarez31@correo.unicordoba.edu.co*

Palabras Claves: Agroindustrialización, Producto del coco, aceite virgen.

En la región de Sinú medio, Córdoba se busca corregir las problemáticas socioeconómicas y fitosanitarias en el sector cocotero, por lo que existe la implementación de híbridos de alta productividad y resistencia. Sin embargo, a este híbrido no se le conoce las ventajas productivas y composicionales para su posterior agroindustrialización. Por lo que se realizó el estudio de las características de la pulpa y del aceite virgen extraído de esta.

Tabla 1. Parámetros fisicoquímicos de la pulpa y el aceite de coco virgen.

Pulpa de coco		Aceite de coco	
Parámetros	**Valores**	**Parámetros**	**Valores**
Humedad	73.68±2.3 %p/p	**pH**	3.6±0.5
Cenizas	1.06±0.13 %p/p	**Índice Acidez**	2.7±0.32 mgKOH/g
Grasas	34.40±3.00 %p/p	**Humedad**	0.25±0.03 %p/p
Proteínas	4.92±0.25 %p/p	**Color**	D65 10°: L* 96.27 a*-0.04 b*0.54
		Olor	Toques de confitados de coco.



Se logró la caracterización de la pulpa del coco, obteniendo un porcentaje alto de grasa (34.40%), por lo que se realizó la extracción obteniendo rendimientos mayores al 50% de aceite por cada gramo de pulpa seca, el cual representa gran potencial para el sector cocotero. Adicionalmente, se realizaron parámetros fisicoquímicos del aceite obteniendo una humedad baja y un olor característico; se confirmó la presencia de los grupos funcionales de los ácidos grasos mediante FTIR y se observó mediante GC/MS qué ácidos grasos lo conforman, observando cantidades altas de ácido láurico C12:0 que tiene acción antimicrobiana, antiviral y fungicida, lo cual ayuda a darle un enfoque a los estudios posteriores del aprovechamiento correcto de este coco híbrido.

Tabla 2. Perfil lipídico del aceite de coco virgen.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Ácidos Grasos en %p/p FAME	
C8:0	4.03
C10:0	3.49
C12:0	34.11
C14:0	17.54
C16:0	9.26
C18:0	4.68
C18:1n9c	5.87
C18:3n6	1.54
C20:0	4.09
C22:0	3.55

Figura 1. Espectro FTIR del aceite de coco virgen.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-353-P ***DISEÑO DEL MUESTREO Y CARACTERIZACIÓN FISICOQUÍMICA PARA LA DETERMINACIÓN DE COMPUESTOS XENOBIÓTICOS EN PIÑA (ANANÁS COMOSUS (L.) MERR) COMERCIALIZADAS EN LA CIUDAD DE SANTIAGO DE CALI***

Diseño del Muestreo y Caracterización Fisicoquímica para la Determinación de Compuestos Xenobióticos en Piña (*Ananás Comosus (L.) Merr*) Comercializadas en la Ciudad de Santiago de Cali.

Diego A. Solarte[a], Nini J. Gutiérrez-Moreno[a*], Juan M. Peña-Herrera[b]

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

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

* Autor de correspondencia: nini.gutierrez00@usc.edu.co

Palabras Claves: Piña; Muestreo; Análisis fisicoquímicos; Plaguicidas.

Desde hace más de una década, la piña se cuenta entre los productos agrícolas con potencial para exportación. A partir del 2017, en el departamento del Valle del Cauca se ha ejecutado el *Plan Integral de Fruticultura*, cuya implementación se ha centrado en trabajar en el fortalecimiento de 9 cadenas productivas, entre ellas la de la piña. El presente Proyecto da a conocer los resultados fisicoquímicos obtenidos del muestreo de piñas comercializadas en la ciudad de Santiago de Cali, recolectadas en diferentes puntos de venta, para un posterior estudio que evaluará la presencia de plaguicidas residuales en la pulpa de la piña. El control ineficaz de este parámetro limita la incursión de pequeños y medianos productores al mercado internacional por sus efectos negativos en la salud y el medio ambiente.

La determinación de los parámetros fisicoquímicos del fruto se realizó conforme a la norma NTC 729-1 para frutas frescas de piña, así como las directrices estipuladas en el *Códex Alimentarius*, específicamente en la Norma CXS 182-1993 para piñas.

Los resultados muestran que el peso de los especímenes está en el rango entre 1239,5 - 2051,6 g. Las piñas maduras presentaron valores más altos de pH (3,68) mientras las demás tienen valores de pH 3,45. El porcentaje de cenizas promedio de la pulpa fue de 0,11 a 0,37% y la humedad está calculada alrededor de 84 - 88 %. Los valores de °Brix, indicaron un mayor contenido de azúcares y madurez sensorial para piñas maduras con 13.77 °Bx, mientras que las piñas verdes tienen 7,78 °Bx. En cuanto al porcentaje de acidez se obtuvo un valor promedio de 0,52% sin variabilidad entre piñas maduras y medianamente maduras, y un valor de 0,43% para pulpa de piña verde. Es importante destacar que los resultados fisicoquímicos están influenciados por el estado de madurez del fruto.

Este proyecto es la primera parte de un macroproyecto que pretende determinar compuestos xenobióticos en la pulpa de la fruta, y se dará la continuidad en la segunda fase para realizar la identificación y posible cuantificación de plaguicidas en pulpa de la piña.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-361-P ***PRINCIPALES NEMATODOS FITOPARÁSITOS PRESENTES EN CULTIVOS DE SOYA Y MAÍZ DE LA ALTILLANURA COLOMBIANA***

Principales Nematodos Fitoparásitos Presentes en Cultivos de Soya y Maíz de la Altillanura Colombiana.

Angie D. Arévalo [a*], **Víctor A. Jiménez** [a], **Anna P. Miranda** [a], **María N. Ortiz** [a]

[a] *Laboratorio Agrícola, Agropecuaria Aliar S.A., Puerto Gaitán – Meta, Colombia*
** Autor de correspondencia: angie.arevalo@aliar.com.co*

Palabras Claves: Nemátodos fitoparásitos, cultivos, daños, soya, maíz.

Los nematodos fitoparásitos son microorganismos que en su mayoría son vermiformes, se caracterizan por poseer en la región anterior una estructura denominada "estilete" con la cual perforan las células de las plantas y extraen sus nutrientes, causando afectaciones a la planta lo que a su vez se convierten en vectores ya que tienen interacciones con otros microorganismos fitopatógenos como hongos y bacterias. Estos nematodos fitoparásitos causan daños y pérdidas significativas en los cultivos agrícolas reduciendo su productividad, por tal motivo es fundamental la identificación y cuantificación de estos microorganismos. En el Laboratorio agrícola de la compañía Aliar S.A. se implementó el método "Flotación-Centrifugación" (Jenkins, 1964; Coolen y D'Herde, 1972) el cual consiste en extraer nematodos presentes en muestras de suelo (o raíz) por medio de las diferencias de densidad entre el agua, nematodos, solución azucarada y suelo o raíz, los nematodos al ser menos densos que la solución azucarada se separan del suelo. A diferencia de otros métodos, esta metodología es rápida y permite extraer ejemplares móviles, huevos y ejemplares inmóviles o muertos. Luego de la extracción se realiza identificación bajo microscopio óptico. Los géneros identificados según sus características morfológicas en muestras de suelo y raíz correspondieron a *Pratylenchus*, *Helicotylenchus*, *Rotylenchulus*, *Meloidogyne* y nematodos de vida libre. Conocer la presencia de estos 3 géneros asociados a los cultivos de soya y maíz es de interés económico, ya que permite al área técnica agrícola de la compañía Aliar S.A. planear un control adecuado para las áreas de mayor afectación en los cultivos de soya-maíz.

Bibliografía

Coolen, W. A., & D'herde, C. J. (1972). A method for the quantitative extraction of nematodes from plant tissue. A method for the quantitative extraction of nematodes from plant tissue.

Gonçalves de Oliveira, C. M., Dos Santos, M. A., & Silva E Castro, L. H. (2016). Diagnose de fitonematoides. Campinas: Millennium.

Jenkins, W. R. B. (1964). A rapid centrifugal-flotation technique for separating nematodes from soil. Plant disease reporter, 48(9).

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-386-P ***EFECTO DE LA FERMENTACIÓN Y LAS TÉCNICAS DE EXTRACCIÓN EN LAS PROPIEDADES Y COMPOSICIÓN DE GRASAS DE COPOAZÚ (TEOBROMA GRANDIFLORUM) COMO INGREDIENTE EN LA INDUSTRIA COSMÉTICA.***

Efecto de la Fermentación y las Técnicas de Extracción en las Propiedades y Composición de Grasas de Copoazú (*Teobroma grandiflorum*) Como Ingrediente en la Industria Cosmética.

L.L. Orduz-Díaz [a], K. Lozano [a], M. P. Carrillo [a], M.S. Hernández [a], R.O. Díaz [a], W.R. Quintero [a] J.E.C, Cardona - Jaramillo [a]*

[a] *Instituto Amazónico de Investigaciones Científicas - Sinchi, Colombia*

* *Autor de correspondencia:* jcardona@sinchi.org.co

Palabras Claves: Copoazú; manteca; fermentación; cosméticos; extracción.

El desarrollo y demanda de los productos cosméticos ha repercutido negativamente en la tala indiscriminada de bosques para aumentar la producción para de ingredientes para este sector. Una de las principales materias primas para la industria cosmética es la manteca de cacao, obtenida de *Theobroma cacao*, usada como emoliente en la elaboración de varios productos. El copoazú (*Theobroma grandiflorum*) es un fruto de origen amazónico que contiene altas cantidades de lípidos útiles en la industria alimenticia y cosmética; sin embargo, se ha demostrado que las características fisicoquímicas de esta grasa pueden variar según el proceso de aprovechamiento, que incluye operaciones postcosecha y de extracción.

Se analizaron muestras de manteca obtenidas bajo diferentes tratamientos: extraída en prensa expeller de semilla sin fermentar (SIN_EXP), extraída en prensa expeller de semilla fermentada (FER_EXP), extraída en prensa hidráulica de semilla sin fermentar (SIN_PF), y extraída en prensa hidráulica de semilla fermentada (FER_PF). La composición en términos de perfil lipídico, índices de calidad, punto de fusión, composición de fitoesteroles y compuestos glicéricos se comparó respecto a una muestra comercial de alta demanda (COM).

Se encontraron diferencias significativas en el índice de saponificación, el cual fue menor en las muestras fermentadas y las extraídas por prensa hidráulica. También se identificó una marcada diferencia con la muestra FER_EXP (59.80 mg de KOH/g muestra), atribuible al proceso de fermentación que produce una acidificación que a altas temperaturas puede causar una hidrolisis parcial de los enlaces éster. En el caso del índice de acidez, solo es comparable la muestra SIN_PF con la muestra comercial. Las muestras fermentadas presentaron mayor contenido de ácidos libres derivados del proceso fermentativo, alterando algunas propiedades organolépticas. Respecto a la composición, las muestras se diferencian por la cantidad de ácido linoleico (entre 4.5 y 6.8 %), siendo la muestra comercial la que presenta menor cantidad (3.52%). Un análisis multivariado realizado con todos los parámetros como variables de ingreso permitió encontrar que no realizar el paso de fermentación y el uso de la prensa en frío hace que la grasa tenga características de calidad y un perfil de ácidos grasos similar a la muestra comercial analizada.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Análisis volatilómico en aguacate Hass (*Persea americana Mill*) para la identificación de potenciales biomarcadores de toxicidad

Juan P. Betancourt [a]*, Gonzalo T. Ocampo [a], Jhon A. Fiscal [a]

[a] *Grupo de Investigación en Cromatografía y Técnicas Afines, Universidad de Caldas, Colombia*
** Autor de correspondencia: juan.betancourt@ucaldas.edu.co*

Palabras Claves: Biomarcadores de toxicidad; Residualidad; Volatilómica; Xenobiótico.

En la actualidad los estudios volatilómicos son utilizados para la obtención del volatiloma, el cual se caracteriza por estudiar los diferentes compuestos orgánicos volátiles (COVs) que son expresados por una determinada matriz, teniendo aplicaciones para la caracterización de nuevos productos naturales, interacciones ecológicas, valoración de la calidad alimentarias, presencia de agentes xenobióticos, entre otros. Por ello, a través de la aplicación de esta ciencia es posible identificar el perfil volatilómico y el xenovolatilómico, inducido por la presencia de agentes externos sobre matrices alimentarias, induciendo a la aplicación de estas ciencias para la identificación de biomarcadores. De esta forma, con la obtención de la fracción volátil en *Persea americana Mill* se pretende identificar potenciales biomarcadores de toxicidad bajo la presencia de agentes xenobióticos tipo plaguicidas. Para dar cumplimiento a este objetivo, se ha establecido una metodología de trabajo a partir del desarrollo de tres etapas. En la primera etapa se evaluó la metodología QuEChERS el cual ya ha sido validado por investigaciones anteriores,[4,5] para la evaluación de la presencia de plaguicidas en aguacate Hass, identificando la naturaleza química de estos compuestos, residualidad de plaguicidas en cáscara, pulpa y semilla, además de evaluar la reproducibilidad y repetibilidad de esta metodología mediante cromatografía de gases con espectrometría de masas (GC – MS). De igual forma, para la obtención de los diferentes COVs que conforman el volatiloma en aguacate Hass, se realizó un proceso de optimización hacia la obtención de las condiciones estacionarias para la metodología de microextracción en fase sólida en espacio de cabeza (HS – SPME) y su respectivo análisis por GC – MS. En la segunda etapa se realiza una identificación de los COVs en *Persea americana Mill*, además de los metabolitos respuesta a la presencia de agentes xenobióticos y finalmente una tercera etapa clasificatoria para muestras de aguacate Hass sanas y contaminadas, mediante el uso de una metodología de análisis multivariado.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-455-P ***DETERMINACIÓN DE COMPUESTOS XENOBIÓTICOS Y POSIBLES PRODUCTOS DE METABOLIZACIÓN EN PIÑAS COMERCIALIZADAS EN LA CIUDAD DE SANTIAGO DE CALI***

Determinación de Compuestos Xenobióticos y Posibles Productos de Metabolización en Piñas Comercializadas en la ciudad de Santiago De Cali

Nini J. Gutiérrez-Moreno[a*], Juan M. Peña-Herrera[b]

[a] Grupo de Investigación en Química y Biotecnología, QUIBIO, Universidad Santiago de Cali, Colombia.
[b] Grupo de Investigación Ciencia de Materiales Avanzados, Universidad Nacional de Colombia Sede Medellín; Colombia.

* Autor de correspondencia: nini.gutierrez00@usc.edu.co

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

Los productos agrotóxicos derivados del uso de plaguicidas destinados a prevenir, eliminar o reducir plagas no deseadas, tanto vegetales como animales, pueden afectar la producción, transformación, almacenamiento, transporte o comercialización de alimentos, madera o piensos. La legislación nacional e internacional exige requisitos de seguridad alimentaria para la comercialización de productos frutales, considerando la posible presencia de residuos de plaguicidas, que representan riesgos para la salud animal y humana, causando intoxicaciones y daños al sistema nervioso, entre otros.

La piña es uno de los principales productos de exportación y consumo en el país, priorizado como una de las cadenas productivas del subsector frutícola en el Valle del Cauca en el Sistema General de Regalías (SGR) entre el 2017 y 2019. A pesar de los esfuerzos del Invima y el Instituto Colombiano Agropecuario, ICA, en el monitoreo de residuos de plaguicidas y contaminantes químicos en productos hortofrutícolas, existe una carencia de estudios y control sobre trazas de plaguicidas en la piña cultivada en Colombia, como lo demuestra el "*Plan de investigación y desarrollo de la cadena productiva de la piña del Valle del Cauca a partir de sus principales brechas tecnológicas*", (Universidad Nacional del Colombia, sede Palmira, año 2021).

El presente estudio en curso proporcionará información crucial sobre las piñas comercializadas en Santiago de Cali, en relación con la presencia de compuestos agrotóxicos. Esta investigación exploratoria, somete las muestras de piñas de diversos puntos de venta en la ciudad, a análisis fisicoquímicos (masa, acidez, humedad, grados Brix, entre otros) y análisis instrumentales de cromatografía de gases y cromatografía líquida acopladas a espectrometría de masas (HPLC-MS/MS y GC-MS/MS) para la detección y cuantificación de compuestos xenobióticos y sus metabolitos en la pulpa del fruto.

Durante el congreso se presentarán los resultados preliminares, que aportan al mejoramiento de la competitividad de la cadena de la piña en el Valle del Cauca. Finalmente, este proyecto aporta en la formación de talento humano (3 estudiantes de pregrado) y reforzará lazos de colaboración interinstitucional entre las entidades participantes y los grupos de investigación que conforman el proyecto.

XIV-471-P ***COMPARACIÓN DE DOS MÉTODOS PARA LA EXTRACCIÓN DE PECTINA A PARTIR DE LA CÁSCARA DE LULO (SOLANUM QUITOENSE) CONTRIBUCIÓN TITULO QUÍMICA***

Comparación de dos Métodos Para la Extracción de Pectina a Partir de la Cáscara de Lulo (*Solanum quitoense)*

María C Gonzalez

Laboratorio Diseño de Nuevos Producto (DNP), Universidad del Quindío, Colombia.
Autor de correspondencia: mcgonzalezl@uqvirtual.edu.co

Palabras clave: pectina; hidrólisis ácida; Ultrasonido; caracterización y metoxilo.

La pectina es de gran interés en la industria de alimentos debido a sus propiedades reológicas que son apropiadas para la elaboración de alimentos aportando así textura y consistencia apropiada. Por esto se realizó la comparación de dos métodos para la extracción de pectina de la cáscara de lulo. Para ello se caracterizó fisicoquímicamente la cáscara de lulo; se trituró y se realizó la extracción de pectina por el método de hidrólisis ácida (HA) y de hidrólisis ácida asistida por ultrasonido (HAUS); para el proceso se tuvieron en cuenta los parámetros de tiempo (30 y 40 min), temperatura (50ºC) y pH (3) constantes, para el ultrasonido, se utilizó una frecuencia de 40 KHz. Después se secó la pectina obtenida y se caracterizó teniendo en cuenta el rendimiento (%RE), el peso equivalente (PE), el contenido de metoxilo (%MeO), ácido anhidrogalacturónico (%AGG) y el grado de esterificación (%GE). Finalmente se identificó mediante microscopía óptica y análisis por espectroscopía FT-IR. Los resultados mostraron que la extracción por HAUS tiene un mayor %RE a los 30 min (4,476%) y a 40 min (4,519%) que el método por HA que presenta a los 30 min (2,086%) y a los 40 min (2,937%). El %MeO y %GE para ambos métodos indica que la pectina de la cáscara de lulo es de bajo metoxilo, presentan valores promedio de %MeO para HA de 6,114 % y para HAUS de 6,078 %, que se encuentran por debajo del 6.7% que según la literatura porcentajes menores a este valor corresponde a pectinas de bajo metoxilo; así mismo él %GE para HAUS a los 30 min (31,782%) y a los 40 min (29,401%) y por HA a los 30 min (35,110) y a los 40 min (27,701%) se hallan por debajo del 50% que según la literatura es una pectina de bajo metoxilo. El PE presento valores mayores por el método de HAUS a los 30 min (14881,073 eq/g) y a los 40 min de (14862,530 eq/g) que por HA a los 30 min (11890,193 eq/g) y a los 40 min (10149,692 eq/g). El método de HAUS se considera un método más efectivo, teniendo en cuenta que obtuvo mayor rendimiento de la pectina en un menor tiempo de extracción y así mismo mejores propiedades.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-473-P ***ESTUDIO DE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA DE SACHA INCHI CULTIVADA EN EL DEPARTAMENTO DEL CAUCA***

Estudio de la Composición Química de Sacha Inchi Cultivada en el Departamento del Cauca

Rodrigo A. Sarria-Villa[a]*; Mara Orozco[b]; José A. Gallo[a]

[a] *Universidad del Cauca, Grupo GIQA, Departamento de Química, FACNED, Popayán-Colombia, Calle 5 # 4-70*
[b]*UNAD, Grupo GIEPRONAL*

*Autor de correspondencia: rodrigosv@unicauca.edu.co

Palabras Claves: sacha inchi, semilla, ácidos grasos insaturados, análisis proximal

Resumen

La producción de sacha inchi en el departamento del Cauca permite la colaboración y retroalimentación de los agentes que están involucrados y se convierte en una oportunidad para reunir distintos sectores como instituciones de educación superior (IES), y productores con el fin de plantear estrategias que permitan dar valor agregado a los productos y/o subproductos y que a su vez contribuyan con el desarrollo sostenible de la cadena de producción con toda su implicación social y económica. Para el caso del Departamento del Cauca, productores pequeños de sacha, constituidos por más de 150 familias, ubicados en los municipios del Tambo y Timbio, tienen la necesidad de fomentar la cadena de producción mediante el conocimiento científico y tecnológico de sus cultivos, conociendo de esta forma el potencial de sus productos y subproductos. El sacha inchi es una fuente de obtención de aceite rico en ácidos grasos insaturados y puede emplearse en la producción de otro tipo de productos derivados como los suplementos alimenticios y/o cosméticos.

En este estudio se trabajó con dos variedades de sacha (FR-16 y catio-215) y a muestras de semillas, cáscara y cascarilla se les determinó el contenido de humedad, cenizas, extracto etéreo, fibra y proteína cruda. Se encontraron contenidos de humedad para la semilla de 2-5% para la variedad catio-215 y 3-7% para la variedad FR-16 respectivamente. En otros trabajos se han reportado niveles de humedad del 4.96% para muestras de semilla de sacha inchi. La variedad catio-215 presentó el contenido de humedad más bajo, lo que indica una baja susceptibilidad al ataque microbial. El contenido de cenizas para la semilla estuvo entre 2% y 5% para catio-215 y FR-16, lo cual indica la distribución de minerales en las diferentes partes del fruto. Los análisis cromatográficos de los aceites de sacha inchi indicaron la presencia principalmente de ácido palmítico, ácido linoleico y ácido esteárico. Los resultados obtenidos hasta el momento han permitido comparar la sacha inchi cultivada en el Departamento del Cauca con la de otras zonas del país y del mundo.

Referencias

2. Codex Alimentarius (1999). Norma para aceites vegetales especificados CODEX STAN 210-1999.
3. Hurtado Ordoñez, Z. (2013). *Análisis composicional de la torta y aceite de semillas de Sacha inchi (plukenetia volubilis) cultivada en Colombia*

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-480-P ***CARACTERIZACIÓN FISICOQUÍMICA Y ESTRUCTURAL DE GALLETAS ADICIONADAS CON PREBIÓTICOS ELABORADAS A BASE DE HARINA DE PULPA DE CAFÉ***

Caracterización Fisicoquímica y Estructural de Galletas Adicionadas con Prebióticos Elaboradas a Base de Harina de Pulpa de Café

Estefanía Arboleda.[a*], Karen J. Valencia.[a], Clara M. Mejía.[a], Jairo Montoya.[a]

[a]*Grupo de Investigación Agroindustria de frutas tropicales. Programa de Química. Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías. Universidad del Quindío. Colombia*

* Autor de correspondencia: *earboledar@uqvirtual.edu.co*

Palabras Claves: Café; Galletas; Caracterisricas; Fisicoquímica; Estructural.

El café (*Coffea arábica*) es un producto alimenticio de gran importancia y demanda mundial, con el cual se preparan bebidas e infusiones a base de su grano tostado y molido. Las industrias productoras de café generan gran cantidad de residuos, siendo la pulpa uno de sus componentes principales que genera gran contaminación si este es depositado al ambiente sin ningún tipo de control; por lo cual se ha recomendado implementar iniciativas para el aprovechamiento de estos subproductos que se generan en la industria caficultora siendo una alternativa convertirlos en ingredientes alimentarios; por esta razón, el objetivo de este trabajo fue evaluar las características fisicoquímicas y estructurales de galletas adicionadas con prebióticos elaboradas a base de harina de pulpa de café con la intención de justificar su potencial uso en la industria alimentaria; para lograr el objetivo propuesto, se utilizó harina de pulpa de café obtenida previamente en el grupo de investigación, la elaboración de las galletas se llevó a cabo mediante la formulación seleccionada (Tabla 1.), las galletas se caracterizaron fisicoquímicamente mediante un análisis proximal, dando como resultado un contenido de humedad de 5,38%, fibra de 6,44%, grasa de 36,4%, cenizas de 3,29%, proteínas de 9,45%, un valor calórico alto de 521,57 Kcal y un total de carbohidratos de 39,04 g/100g.) (Tabla 2.); también se realizó la caracterización estructural mediante la determinación de peso (g), diámetro (mm), espesor (mm), radio (mm) y volumen específico (cm^3) el cual se determinó por desplazamiento de semillas de arroz y la textura mediante el análisis de la dureza de la miga de acuerdo al método 74-09 (AACC, 2000); los parámetros físicos se presentan en la Tabla 3, el análisis de textura presentó valores de dureza 1501,683 kg m S^{-2}, fracturabilidad 521,972, cohesividad 0,367 y masticabilidad 160,786 (Tabla 4). La galleta de café presenta características fisicoquímicas y estructurales atractivas que, comparadas con galletas comerciales, permiten su utilización y comercialización en el diseño de alimentos funcionales, debido a su alto contenido nutricional, resaltando los contenidos de fibra, carbohidrato y proteína.

Tabla 1. *Formulación de la galleta*

Componentes	F1	F2	F3	F4	F5
Harina de cereza de café (g)	100	75	50	27	0
Harina de maíz (g)	0	25	50	75	100
Huevo(und)	1	1	1	1	1
Mantequilla (g)	80	80	80	80	80
Inulina (mg)	750	750	750	750	750

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Tabla 2. Caracterización fisicoquímica y proximal de la galleta

Muestras	*Galleta*
Valor calórico (Kcal)	521,57 ± 2,63
%H	5,38± 0,02
% Proteína	9,45±0,03
% Cenizas	3,29± 0,03
% Grasa	36,40±0,49
%Fibra	6,44 ± 0,04
Carbohidratos totales (g/100g)	39,04±0,48

Tabla 3. Parámetros físicos de la galleta de HPC

Muestra	Peso (g)	Diámetro (mm)	Espesor (mm)	Radio (mm)	Volumen especifico (cm^3)
Galleta	3,36 ± 0,24	32 ± 0,00	4 ± 0,00	16 ± 0,00	3,217 ± 0,00

Tabla 4. Perfil de textura para la galleta con harina de pulpa de café (GHPC) y la galleta de harina de trigo (GHT)

Muestra	Dureza (kg m S^{-2})	Fracturabilidad	Cohesividad	Masticabilidad
Galleta	1501,683 ± 0,48	521,972 ± 0,62	0,367 ± 0,08	160,786 ± 0,32

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Características Fisicoquímicas y Estructurales de Harina de Pulpa de Café (*Coffea Arabica)*

Estefanía Arboleda.[a], Karen J. Valencia.[a*], Clara M. Mejía.[a], Jairo Montoya.[a]

[a]*Grupo de Investigación Agroindustria de frutas tropicales. Programa de Química. Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías. Universidad del Quindío. Colombia*

* Autor de correspondencia: *kjvalenciag@uqvirtual.edu.co*

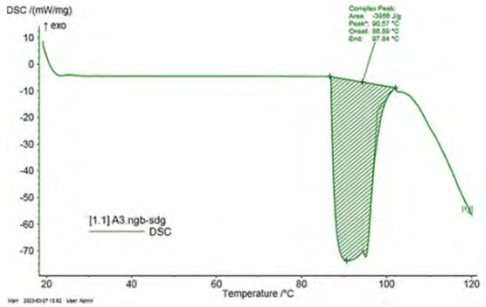
Palabras Claves: Café; Harina; Caracterisricas; Fisicoquímica; Estructural.

El café (*Coffea arábica*) es un producto alimenticio de gran importancia y demanda mundial, con el cual se preparan bebidas e infusiones a base de su grano tostado y molido. Las industrias productoras de café generan gran cantidad de residuos, siendo la pulpa uno de sus componentes principales que genera gran contaminación si este es depositado al ambiente sin ningún tipo de control; por lo cual se ha recomendado implementar iniciativas para el aprovechamiento de estos subproductos que se generan en la industria caficultora siendo una alternativa convertirlos en ingredientes alimentarios; por esta razón, el objetivo de este trabajo fue evaluar las características fisicoquímicas y estructurales de la harina de la pulpa de café (*Coffea arábica*) con la intención de justificar su potencial uso en la industria alimentaria; para lograr el objetivo propuesto, se recolectó el material vegetal, se secó, se molió y tamizó para obtener la harina de pulpa de café la cual se caracterizó fisicoquímicamente mediante un análisis proximal, dando como resultado que la harina presentó un contenido de humedad de 11,30%, fibra de 17,55%, grasa de 2,43%, cenizas de 7,66%, proteínas de 13,17%, un valor calórico de 266,11 Kcal y un total de carbohidratos de 47,9 g/100g (Tabla 1.), también se realizó la caracterización estructural, mediante calorimetría diferencial de barrido (DSC) y espectrofotometría (IR), en la región del infrarrojo medio comprendido entre 4.000 y 400 cm^{-1}; el DSC arrojó una temperatura de inicio de gelatinización de 86,89°C, una temperatura de pico de 90,57°C, una temperatura final del proceso de 97,84°C y una entalpía de gelatinización de -3856J/g (Figura 1), el IR se comparó con harinas comerciales obteniéndose bandas similares (Figura 2). La harina de pulpa de café presenta características fisicoquímicas y estructurales atractivas que, comparadas con harinas comerciales, permiten su utilización en el diseño de alimentos funcionales, debido a su alto contenido nutricional, resaltando los contenidos de fibra, carbohidrato y proteína.

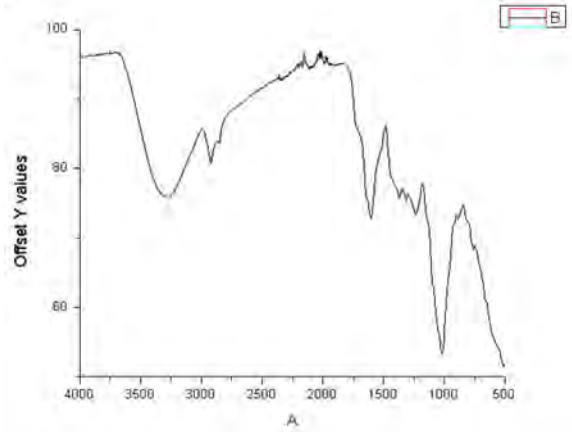
Tabla 1. Caracterización fisicoquímica y proximal de harina de pulpa de café.

Muestras	HPC
Valor calórico (Kcal)	266,11 ± 0,36
%Humedad	11,30 ± 0,15
% Proteína	13,17 ± 0,20
% cenizas	7,66 ± 0,07
% Grasa	2,43 ± 0,20
%Fibra	17,55 ± 0,21
Carbohidratos totales (g/100g)	47,9 ± 0,73

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.



Fígura 1. Termograma de DSC harina de pulpa de café



Fígura 2. Termograma de FTIR de la harina de pulpa de Café

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Elaboración De Una Mayonesa Reducida En Grasa Empleando Aceite De Seje (*Oenocarpus batua*) Y Almidón Waxy De Yuca (*Manihot esculenta*)

Laura Beltrán[a], Elizabeth Gil[b], Andrés Giraldo Toro[a], Diego Ballesteros Vivas[a*]

[a] *Grupo de investigación en Alimentos, Nutrición y Salud, Facultad de Ciencias, Pontificia Universidad Javeriana, Colombia.*
[b] *Grupo de investigación en Alimentos, Nutrición y Salud, Facultad de Ciencias, Pontificia Universidad Javeriana, Colombia.*
** Autor de correspondencia: diego_ballesteros@javeriana.edu.co*

Palabras Claves: Aceite de seje, mayonesa baja en grasa, extracción, almidón waxy.

El seje es una especie amazónica que ha sido usada tradicionalmente por comunidades indígenas como materia prima para la elaboración de productos alimenticios. Entre estos alimentos se encuentran: aceites, bebidas fermentadas y postres (Chaves Yela et al., 2020). Tradicionalmente, el aceite ha sido obtenido de manera artesanal por cocción acuosa y prensado manual. Este aceite se caracteriza por su alto contenido de los ácidos oléico (66.2%) y linoléico (12.1%), lo que lo convierte un alimento de gran potencial por su valor nutricional y biológico (Pinto et al., 2018). En el presente trabajo, se obtuvo la fracción lipídica del fruto de seje usando un extractor Soxhlet a presión reducida (60 mbar y 50 °C) y empleando *n*-heptano como disolvente, con un rendimiento de 47,25% (base seca). La composición del aceite fue determinada utilizando cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas de alta resolución (GC-EI-q-TOF). Posteriormente, se determinó la densidad, índice de acidez (Te 1a-64), índice de peróxido (Cd 8–53), índice de yodo (Cd 1–25) e índice de saponificación (Cd 3c-91) de acuerdo con los métodos de la *Official Methods and Recommended Practices of the American Oil Chemists' Society* (AOCS). Por otra parte, la se estableció la estabilidad oxidativa del aceite siguiendo la metodología Rancimat®. Una vez caracterizado el aceite, se elaboraron tres formulaciones de mayonesa reducida en grasa empleando tres niveles de almidón waxy (>98% amilopectina). Las propiedades reológicas estudiaron determinando el índice de actividad emulsificante, el índice de estabilidad emulsificante y la viscosidad aparente. Este trabajo aporta conocimiento sobre el uso potencial del aceite de seje para elaboración de alimentos con un mayor nivel de transformación, lo que a su vez podrá impactar en la valorización de este fruto subutilizado.

Referencias

Chaves Yela, J. A., Ortiz Tobar, D. P., Bahos Ordoñez, E. M., Ordoñez Forero, G. A., & Villota Padilla, D. C. (2020). Análisis del perfil de ácidos grasos y propiedades fisicoquímicas del aceite de palma de mil pesos (Oenocarpus Bataua). Perspectivas En Nutrición Humana, 22(2), 175–188. https://doi.org/10.17533/udea.penh.v22n2a05

Pinto, R. H. H., Sena, C., Santos, O. V., Da Costa, W. A., Rodrigues, A. M. C., & Carvalho, R. N. (2018). Extraction of bacaba (oenocarpus bacaba) oil with supercritical CO2: Global yield isotherms, fatty acid composition, functional quality, oxidative stability, spectroscopic profile and antioxidant activity. Grasas y Aceites, 69(2). https://doi.org/10.3989/gya.0883171

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XIV-501-P ***EVALUACIÓN DE PROPIEDADES ANTIOXIDANTES Y ANTIBACTERIALES DE EXTRACTOS ACUOSOS A BASE DE UNA MEZCLA DE RESIDUOS DE PIÑA (ANANAS COMOSUS) MD2 "ORO MIEL"***

Evaluación de Propiedades Antioxidantes y Antibacteriales de Extractos Acuosos a Base de una Mezcla de Residuos de Piña (*Ananas comosus*) MD2 "Oro miel"

Juan D. Yarce Botero[a], Sharon A. González Henao[a], Anyela M. Ríos Ríos[a], Fernando A. Areiza Vélez[b], Oscar M. Mosquera Martínez[a], Jaime A. Martínez Acosta[a,b]*

[a] Grupo de Investigación Biotecnología-Productos Naturales, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia
[b] Grupo de Investigación Laboratorio de Productos y Emprendimiento, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia
** Autor de correspondencia: jaalmartínez@utp.edu.co*

Palabras Claves: *Ananas comosus,* antibacteriano; antioxidante; aprovechamiento de residuos; compuestos fenólicos.

Colombia es uno de los principales productores de piña a nivel mundial, siendo la variedad MD2 (oro miel) una de las más cultivadas en el territorio; sin embargo, la producción y el posterior procesamiento de esta fruta genera gran cantidad de desechos. Es necesario encontrar alternativas para el aprovechamiento de residuos como hojas, cáscara y corazón del fruto, teniendo en cuenta que estos pueden ser fuente de compuestos de interés biológico o industrial.

El objetivo de este trabajo fue obtener un biopreparado tipo infusión, a partir de residuos de piña, para esto se evaluaron tres mezclas de material vegetal, conformadas por distintas partes de residuos generados al procesar la piña: hojas de la planta, cáscaras y corazón, junto con la pulpa del fruto, en diferentes proporciones. Mediante análisis de superficie se determinó las mejores condiciones de extracción para obtener la mayor actividad antioxidante teniendo como variables la proporción masa:agua y el tipo de mezcla.

Distintas propiedades de las infusiones o extractos obtenidos fueron evaluados: su capacidad antioxidante por el método DPPH·, donde se obtuvieron valores entre 1,275 y 2,701 µg Equivalentes Trolox(ET)/mg Masa seca(Ms); el contenido de fenoles totales por el método de Folin-Ciocalteu, el cual varió de 26,13 a 43,19 µg Equivalentes de Ácido Gálico (AG)/mg Ms. La capacidad antimicrobiana frente *Staphylococcus aureus* y *Escherichia coli*, obteniéndose una inhibición moderada y nula respectivamente. En cuanto a sus propiedades antifúngicas frente a *Aspergillus niger* no hubo inhibición en el crecimiento.

Finalmente, se identificaron y cuantificaron, por medio de HPLC-DAD, los siguientes compuestos fenólicos en las mezclas: ácido gálico, ácido *p*-hidroxibenzoico, ácido clorogénico, ácido vanílico, acido cafeico, ácido siríngico, ácido *p*-cumárico, ácido ferúlico, ácido cinámico y kaempferol. El ácido gálico y el ácido vanílico, son los acido fenólicos que se encontraron en mayor proporción con 0,1590 mg gMs^{-1} y 0,0427 mg gMs^{-1} respectivamente. Las infusiones obtenidas tienen potencial para aportar propiedades terapéuticas, dada su actividad antioxidante y variedad de compuestos fenólicos, esto haciendo uso de los residuos generados durante el procesamiento de la piña.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA DE MATERIALES

V-115-P ***EVALUACIÓN DE LAS PROPIEDADES ÓPTICAS DE PUNTOS CUÁNTICOS DE GRAFENO PARA APLICACIÓN EN PROCESOS FOTODINÁMICOS***

Evaluación de las propiedades ópticas de puntos cuánticos de grafeno para aplicación en procesos fotodinámicos

Juan D. Arenas [a]*, Diana Blach [b], Cristian C. Villa [b]

[a] *Grupo de Investigación en Fisicoquímica Ambiental y Computacional (GIFAC), Estudiante del programa de Química de la Universidad del Quindío, Colombia.*
[b] *Grupo de Investigación en Fisicoquímica Ambiental y Computacional (GIFAC), Docente del programa de Química de la Universidad del Quindío, Colombia.*
** Autor de correspondencia: juand.arenasa@uqvirtual.edu.co*

Palabras Claves: Puntos cuánticos de grafeno; fotoluminiscencia; rendimiento cuántico y terapia fotodinámica.

Los puntos cuánticos de grafeno (GQD), son nanomateriales a base de carbono que muestran propiedades ópticas y electrónicas de interés tecnológico debido a su confinamiento cuántico y el efecto de los grupos funcionales en sus bordes. Las propiedades fisicoquímicas de estos materiales son únicas, poseen una fotoluminiscencia distintiva y sintonizable, fotoestabilidad, biocompatibilidad y baja toxicidad, atraen la atención de diferentes campos de la ciencia gracias a las diversas y potenciales aplicaciones, en particular su uso en la implementación de terapias fotodinámicas es un campo de gran auge en la actualidad, ya que representa una alternativa importante para la solución de diversas problemáticas de salud pública. En este trabajo se establecieron las condiciones fisicoquímicas óptimas para la obtención sustentable de puntos cuánticos de grafeno coloidal, se sintetizaron puntos cuánticos de grafeno utilizando como precursores ácido cítrico y tiourea, la reacción se llevó a cabo en un reactor de microondas controlando el tiempo y la temperatura. Se evaluó el efecto de la proporción de los precursores sobre las propiedades ópticas, absorción y emisión de los compuestos obtenidos, así mismo se determinó el rendimiento cuántico (φ) de los GQD coloidales en medio acuoso. Los resultados de las mediciones espectrales, demuestran como las propiedades ópticas de los GQD pueden ser sintonizadas en función de la proporción de los precursores empleados en la síntesis, del mismo modo se identificaron los tipos de transiciones e interacciones que los GQD exhiben frente a una longitud de onda de excitación especifica, y se encontró que el φ es proporcional a la presencia de ácido cítrico en el método de síntesis. En consecuencia, se encontró que el método de síntesis empleado para la obtención de los GQD coloidales representa una forma sustentable y eficiente que puede emplearse en la obtención de materiales con excelentes propiedades fotoluminiscentes y que por lo tanto pueden tener una significativa respuesta al ser empleados en terapia fotodinámica.

Yan, H., Zhang, B., Zhang, Y., Su, R., Li, P., & Su, W. (2021). https://doi.org/10.1021/acsabm.1c00377

V-116-P ***DEVELOPMENT OF YBA2CU3O7-BA2YTAO6 NANOCOMPOSITES BY CHEMICAL SOLUTION DEPOSITION***

Development of $YBa_2Cu_3O_7$-Ba_2YTaO_6 Nanocomposites by Chemical Solution Deposition

Paula A Garcés [a*], **Héctor F Castro** [a]

[a, b] *Grupo de Investigación CRYOMAG, Universidad Nacional de Colombia, Colombia*
[*] *Autor de correspondencia: Paula A Garcés*

Keywords: CSD; YBCO; BYTO; nanocomposites; secondary phases

In this work we report the study of chemical solution deposited (CSD) YBa2Cu3O7-δ (YBCO) nanocomposite thin films, with Ba2YTaO6 (BYTO) nanoparticles. We studied the influence of thermal treatment on the properties of nanocomposites, with different content of secondary phases (6%, 10% and 20%). We measured the film microstructure, nanostrain and the superconducting properties: critical temperature (Tc) and critical current density (Jc). The films were characterized using X-rays diffraction and SQUID inductive measurements. The use of two steps in the termal treatment allowed to increase the nanostrain up to 0.30% for high nanoparticle loads (20%BYTO), decrease the nanoparticle size down to 15 nm and lead a smoother Jc(H) dependence, compared with the standard (single-step) thermal process and the pristine YBCO films.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-121-P ***ACTIVIDAD ANTICANCERÍGENA DE ÓXIDO DE GRAFENO CONTRA OSTEOSARCOMA Y SU BIOCOMPATIBILIDAD IN VITRO E IN VIVO***

Actividad Anticancerígena de Óxido de Grafeno Contra Osteosarcoma y Su Biocompatibilidad In vitro e In Vivo

Carlos D. Grande-Tovar [a], * **Manuel N. Chaur** [b], **José H. Mina** [b], **Carlos H. Valencia** [c], **Gian C. Bastidas** [d]

[a] *Grupo de investigación en Fotoquímica y Fotobiología, Facultad de Ciencias básicas, Universidad del Atlántico, Colombia*
[b] *Grupo de Materiales Compuestos, Escuela de Ingeniería de Materiales, Universidad del Valle*
[c] *Grupo Biomateriales Dentales, Escuela de Odontología, Universidad del Valle*
[d] *Grupo de investigación en Síntesis y mecanismos de reacción en química orgánica, Facultad de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad del Valle*

* *Autor de correspondencia: carlosgrande@mail.uniatlantico.edu.co*

Palabras Claves: Anticancerígeno; biocompatibilidad; cáncer de hueso; óxido de grafeno; osteosarcoma.

El osteosarcoma es considerado uno de los cánceres más frecuentes en el mundo, el cual se puede observar por medio de radiografías como una masa blanda sobre la superficie del hueso, disminuyendo la movilidad del área afectada. Entre los tratamientos más efectivos está la cirugía, pero en ciertos casos esto no es efectivo, por lo que métodos como la radioterapia o la amputación son una buena alternativa. Para evitar llegar a estos extremos es de gran importancia obtener nuevos métodos químicos que no afecten al usuario. El grafeno es un material bidimensional constituido por una sola lámina de átomos de carbono que presenta propiedades únicas y también desventajas, las cuales pueden verse alteradas al realizar una fuerte oxidación. El óxido de grafeno (OG) ha presentado una gran variedad de aplicaciones, especialmente en el área de la biomedicina debido a su área superficial rica en electrones procedentes de grupos oxigenados. Para observar la actividad anticancerígena contra osteosarcoma y su biocompatibilidad, se sintetizó OG por medio de dos métodos químicos basados en el procedimiento Hummers modificado, además de obtener muestras a diferentes grados de oxidación por medio del método 1, obteniendo láminas y películas de este compuesto; además de realizarles una liofilización. Las muestras obtenidas presentan una banda ancha característica cercana a los 3250 cm^{-1} correspondiente a estiramiento O-H (Fig. 1b) y en el espectro Raman se observan 2 bandas entre los 1000–2000 cm^{-1} (Fig. 1a); ambos resultados permitieron confirmar la presencia de grupos oxigenados en la estructura de las muestras de OG. Las muestras liofilizadas presentaron una mejora en sus espectros, disminuyendo la intensidad de algunas bandas generadas por la presencia de contaminantes y mejorando la calidad de las bandas más importantes. Las micrografías obtenidas por AFM y SEM permitieron confirmar que las láminas presentan entre 190 – 200 capas de óxido de grafeno (Fig. 1c y 1d), poniendo en duda si se trata de óxido de grafeno o óxido de grafito.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

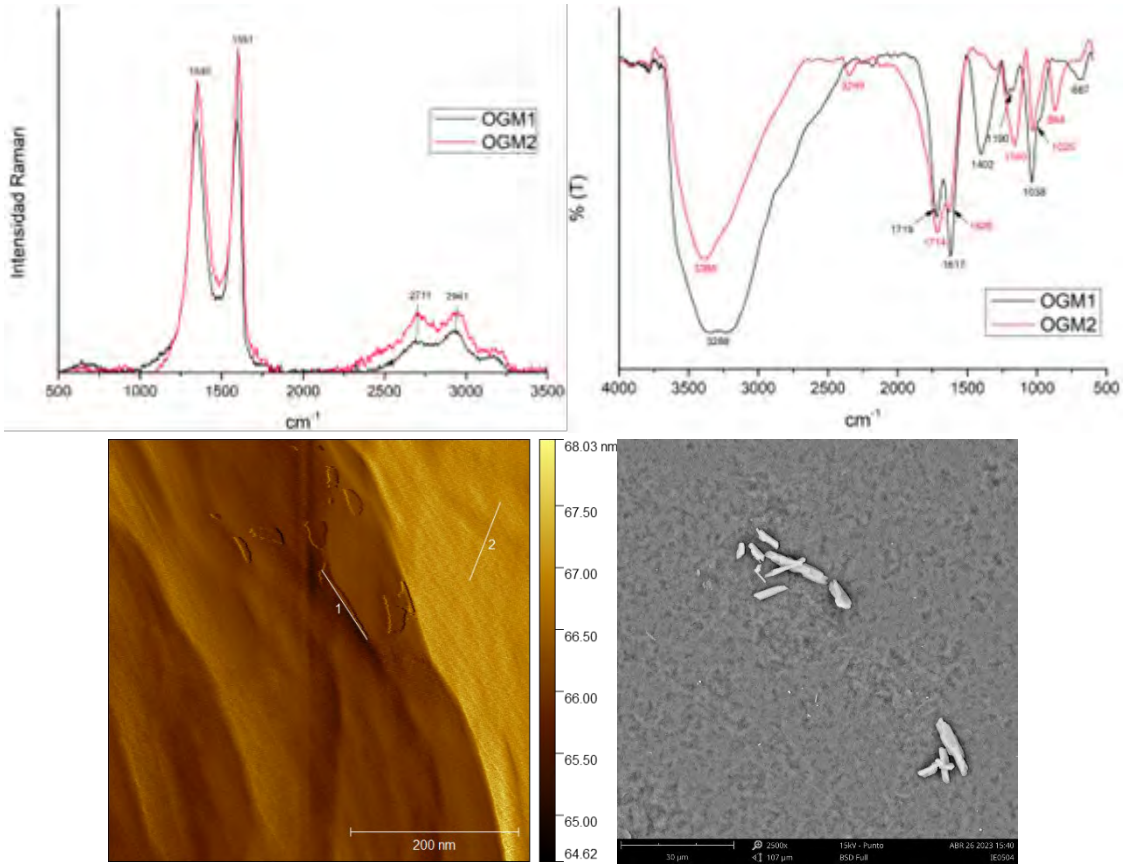


Figura. 1 a) *Espectro Raman (OG);* ***b)*** *Espectro FTIR (OG);* ***c)*** *Micrografía AFM (OG);* ***d)*** *Micrografía SEM (OG).*

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-125-P ***ELABORACIÓN DE PELÍCULAS DELGADAS DE PARTÍCULAS DE TIO2 Y N-TIO2 PARA SU INCORPORACIÓN EN CELDAS SOLARES SENSIBILIZADAS POR PIGMENTOS***

Elaboración de Películas Delgadas de Partículas de TiO_2 y N-TiO_2 para su Incorporación en Celdas Solares Sensibilizadas por Pigmentos

Luisa N. Córdoba[a*], Alejandro Ortiz[b], Mario Millán[c]; Milton Manotas[d]; Lorena Marín[a*]

[a] *Grupo de Investigación en Películas Delgadas y Nanoestructuras, Universidad del Valle, Colombia*
[b] *Grupo de Investigación en Compuestos Heterocíclicos, Universidad del Valle, Colombia*
[c] *Instituto de Energías Renovables, Universidad Nacional Autónoma de México, México*
[d] *Grupo de Investigación en Física Aplicada (GIFA), Universidad del Norte, Colombia*
**Autores de correspondencia: luisa.urresti@correounivalle.edu.co ; marin.lorena@correounivalle.edu.co*

Palabras Clave: DSSC; sol-gel; películas; TiO_2; N-TiO_2

El dióxido de titanio (TiO_2) mesoporoso es ampliamente reconocido como la opción preferente entre los óxidos semiconductores utilizados en los fotoánodos de las células solares sensibilizadas por pigmentos (DSSC's). Aunque el material ofrece ventajas significativas, presenta ciertas limitaciones en términos de eficiencia, como su capacidad de absorción de luz, la cual se restringe al rango ultravioleta, y una baja movilidad de electrones.[1] Por esta razón, el objetivo principal de este trabajo fue mejorar el rendimiento del TiO_2 mesoporoso en su fase anatasa mediante la incorporación de nitrógeno en su estructura cristalina (Figura 1), para elaborar películas delgadas aplicables a los fotoánodos de los dispositivos anteriormente mencionados.

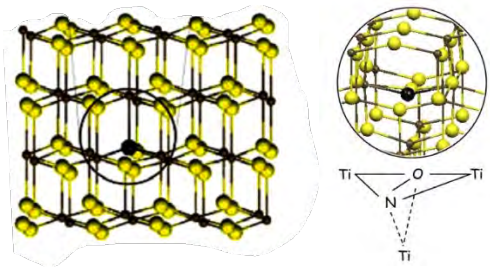


Figura 1. Estructura cristalina del TiO_2 en la fase anatasa dopada con nitrógeno (intersticial).[2]

La metodología consistió en sintetizar partículas de TiO_2 dopadas con nitrógeno (N-TiO_2) mediante el método sol-gel, las cuales se incorporaron a una suspensión coloidal de nanopartículas de TiO_2 también obtenida por el mismo método. A partir de esta mezcla, se fabricaron películas delgadas mediante la técnica de spin coating que luego se calcinaron a 450 °C. Se realizó un análisis óptico, que se complementó mediante difracción de rayos X, espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) y microscopía electrónica de barrido con análisis de dispersión de energía (SEM-EDS). Como resultado se obtuvo una mejora muy considerable en la respuesta de absorbancia en el rango visible, debido a la expansión de las dimensiones de la red cristalina, así como una disminución de la resistencia superficial en comparación con las películas elaboradas exclusivamente con nanopartículas de TiO_2.

Referencias:

[1]. Shakeel Ahmad, M., Pandey, A. K., & Abd Rahim, N. (2017). Advancements in the development of TiO_2 photoanodes and its fabrication methods for dye sensitized solar cell (DSSC) applications. A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 77, 89–108. https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.03.129

[2]. Di Valentin, C., Finazzi, E., Pacchioni, G., Selloni, A., Livraghi, S., Paganini, M. C., & Giamello, E. (2007). N-doped TiO2: Theory and experiment. *Chemical Physics*, 339(1-3), 44–56. https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2007.07.020

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-126-P ***CARACTERIZACIÓN Y EVALUACIÓN DE DESEMPEÑO DE RESIDUO SIDERÚRGICO COMO CATALIZADOR EN EL PROCESO DE OZONIZACIÓN PARA LA REMOCIÓN DE FÁRMACOS EN CUERPOS DE AGUA.***

Caracterización y Evaluación de Desempeño de Residuo Siderúrgico Como Catalizador en el Proceso de Ozonización para la Remoción de Fármacos en Cuerpos de Agua.

Valeria A Villegas [a]*, Julián A Vanegas [b], Renso R Visbal [c], Malka I Mora [d]

[a,b,c,d] Departamento de Química, Universidad del Valle, Colombia.
** Valeria A Villegas: valeria.villegas@correounivalle.edu.co*

Palabras Claves: Ozonización catalítica; óxidos de hierro; catálisis; contaminantes emergentes (CEs).

La presencia de contaminantes emergentes (CEs) en cuerpos de agua es un tema de preocupación debido a que los procesos convencionales de tratamiento de agua no son capaces de removerlos; las trazas de fármacos son una clase de CEs, que al estar presentes en aguas residuales pueden acarrear una serie de efectos negativos en la salud del ser humano.[1,2] Entre las nuevas soluciones para remover los CEs, se encuentra la ozonización catalítica, un proceso de oxidación avanzado que permite la degradación de contaminantes presentes en agua; el poder oxidante del O_3 permite un ataque directo al contaminante a remover, o un ataque indirecto mediante la formación de radicales (OH·). Adicionalmente, el catalizador juega un papel crucial en este proceso, mejorando la eficiencia de remoción del contaminante. En este trabajo de investigación se utilizará como catalizador un residuo de la industria siderúrgica llamado Calamina, una mezcla de óxidos de hierro que ha sido caracterizado utilizando técnicas como SEM-EDS, DRX, Espectroscopía Mössbauer y Espectroscopía Raman, encontrando la presencia de Magnetita (Fe_3O_4) y Wüstita (FeO) como especies mayoritarias. Finalmente, se seguirá el porcentaje de remoción de dos fármacos (Ciprofloxacino y Sulfametoxazol) mediante ozonización catalítica con calamina, haciendo uso de cromatografía líquida U-HPLC, dándole así un valor agregado a este desecho de la industria.

Referencias

1. González-Labrada, K.; Richard, R.; Andriantsiferana, C.; Valdés, H.; Jáuregui-Haza, U. J.; Manero, M.-H. ENVIRONMENTAL AND SUSTAINABLE CHEMICAL ENGINEERING Enhancement of Ciprofloxacin Degradation in Aqueous System by Heterogeneous Catalytic Ozonation. https://doi.org/10.1007/s11356-018-3559-9/Published.

2. Shahmahdi, N.; Dehghanzadeh, R.; Aslani, H.; Bakht Shokouhi, S. Performance Evaluation of Waste Iron Shavings (Fe0) for Catalytic Ozonation in Removal of Sulfamethoxazole from Municipal Wastewater Treatment Plant Effluent in a Batch Mode Pilot Plant. Chemical Engineering Journal 2020, 383. https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.123093.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

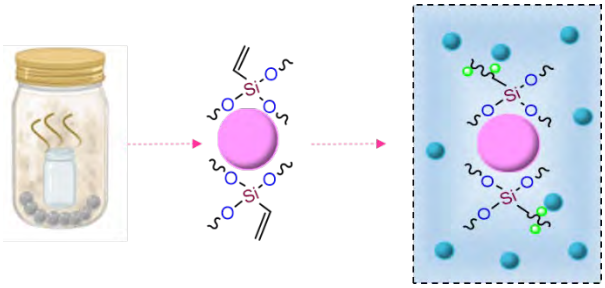
V-127-P ***POLI(CLORURO DE VINILO) MODIFICADO PARA SÍNTESIS DE POLÍMEROS FUNCIONALES POTENCIALMENTE APLICABLES AL TRATAMIENTO DE AGUAS***

Poli(cloruro de vinilo) Modificado para Síntesis de Polímeros Funcionales Potencialmente Aplicables al Tratamiento de Aguas

Nathalia Paredes, *Manuel S. Palencia

Grupo de investigación en Ciencias con Aplicaciones Tecnológicas, Universidad del Valle, Colombia
**Autor de correspondencia: manuel.palencia@correounivalle.edu.co*

Palabras claves: Poli(cloruro de vinilo); funcionalidad; fisisorción; polímero funcional.



El Poli(cloruro de vinilo) (PVC) es un polímero termoplástico de bajo costo, con una excelente combinación de propiedades físicas y químicas que lo clasifican como uno de los materiales más versátiles por su capacidad de adaptación a distintas funciones y aplicaciones. A pesar de sus bondades, el PVC es un material que carece de funcionalidad, es predominantemente apolar, lo que limita su aplicación en la remoción de contaminantes solubles en agua y, desde el punto de vista metodológico, la mayoría de modificaciones requieren solubilización, precipitación y purificación. De acuerdo a datos de la ONU, más del 80% de ríos y mares son contaminados por actividades domésticas e industriales, por lo que la investigación y el desarrollo de tecnologías versátiles y de bajo costo para el tratamiento de agua se considera una de las metas para garantizar la disponibilidad y gestión sostenible del agua. Por este motivo, en esta investigación, la superficie del PVC se modificó con dobles enlaces carbono-carbono (C=C) el cual posteriormente se funcionalizó para obtener polímeros potencialmente aplicables al tratamiento de sistemas acuosos. Para ello, la modificación se llevó a cabo en un solo paso mediante un proceso de fisisorción promovido por la hidrólisis y auto condensación de un haluro de silano y, la obtención del polímero funcional, se realizó vía radicales libres utilizando como monómero ácido acrílico. Los resultados por análisis IR y RMN ^{13}C confirman el doble enlace C=C en la superficie del PVC a 1600 cm^{-1}, 130 y 135 ppm, respectivamente. En relación al PVC funcionalizado, dos vibraciones de baja intensidad a 1710 y 3300 cm^{-1} identificadas por IR sugieren la presencia de grupos ácido carboxílico (COOH) en el PVC. Dicho lo anterior se concluye que la superficie del PVC puede ser modificada con dobles enlaces mediante una adsorción física que tiene la ventaja de llevarse a cabo en un solo paso metodológico, libre de solvente y sin pasos de purificación. En cuanto a la funcionalización, los grupos fácilmente ionizables en la superficie del PVC lo convierten en un material con propiedades potencialmente aplicables al tratamiento de iones metálicos en agua.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-128-P ***DETERMINACIÓN DE XANTINAS A PARTIR DE UN ELECTRODO DE PASTA DE CARBONO MODIFICADO CON BENTONITA/CISTEÍNA***

Determinación de xantinas a partir de un electrodo de pasta de carbono modificado con bentonita/cisteína

Nathalia A. Venegas[a], Leidy Y. Castro[a], Jaime F. Martínez[a], Lisette D. Ruiz[a]*

[a]Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de la Amazonia, Florencia-Colombia
* *Autor de correspondencia:* lis.ruiz@udla.edu.co

Palabras Claves: electroanalítica; cafeína; ácido úrico; ácido ascórbico; grafito

Las xantinas son heterociclos derivados de las purinas (bases nitrogenadas), y se encuentran en la mayoría de los tejidos y fluidos corporales humanos. Por ejemplo, el ácido úrico (AU) producido en el hígado, músculos, intestinos, riñones y endotelio vascular como producto final del catabolismo de la adenina y guanina mediante la acción de la enzima xantina oxidasa. Por otro lado, la cafeína (Caf), teofilina y teobromina son derivados de la metilxantina que en cantidades moderadas funcionan como estimulantes, y se encuentran en bebidas como café, té, mate o chocolate. El siguiente trabajo de investigación presenta la fabricación de electrodo de pasta de carbono (CPE) modificado con bentonita (B/CPE) y cisteína (Cis/B/CPE) para determinación de AU y Caf. El CPE, B/CPE y Cis/B/CPE se preparó mezclando 48 mg de polvo de grafito comercial; 4,8 mg bentonita; 3,6 L-cisteina con 24 mg de parafina como aglutinante. La mezcla se empaqueto en un tubo de resina epoxi hasta obtener una superficie homogénea, luego se realizó un pulido mecánico con una lija grano medio, y se lavó con etanol/agua para eliminar residuos. La caracterización electroquímica, estabilidad y repetibilidad de los electrodos se realizó por voltamperometría cíclica (CV) utilizando una solución 50 mM de $[Fe(CN)_6]^{3-/4-}$ 1:1 en KCl 0,1 M. La cuantificación de AU, Caf y evaluación de un interferente (ácido ascórbico, AA) se realizó por voltamperometría de onda cuadrada (SWV) o pulso diferencial (DPV) en solución amortiguadora de fosfatos a 50 mM y pH 7. Todos los electrodos son electroactivos frente a la cupla redox $[Fe(CN)_6]^{3-/4-}$. El Cis/B/CPE almacenados en etanol y aire durante cinco días presento una mayor estabilidad para etanol. Además, de una alta repetibilidad en su fabricación. Para Cis/B/CPE se observó una mayor corriente de pico para oxidación (I_{pa}) de AU con respecto a CPE y B/CPE. Sin embargo, AA se presenta como un interferente debido solapamiento de la señal de AU. La cuantificación de AU por SWV presento un LOD 131,25 ppm y LOQ 397,73 ppm. Para el analito Caf se empleó B/CPE debido a una mayor I_{pa} con respecto a CPE y Cis/B/CPE. La cuantificación de Caf por DPV presento un LOD 12,05 ppm y LOQ 36,54 ppm.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-226-P ***SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE PUNTOS CUÁNTICOS Y SU ESTABILIZACIÓN EN PARTÍCULAS DE ALMIDÓN***

Síntesis y caracterización de puntos cuánticos y su estabilización en partículas de almidón

Andrés C. Giraldo [a], J. Alejandro Arboleda-Murillo[b], Cristian C. Villa[a]*

[a] Programa de Química. Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías, Universidad del Quindío
b Grupo de Investigación en Fisicoquímica Ambiental y Computacional, Universidad del Quindío.
** Autor de correspondencia: ccvilla@uniquindio.edu.co*

Palabras Claves: Almidón; Espectroscopía; Fluorescencia; Puntos cuánticos;

El empleo de nanomateriales en las técnicas de imagenología celular ha permitido facilitar no solamente el diagnóstico sino también el tratamiento de diferentes enfermedades en los seres humanos, siendo los más utilizados los puntos cuánticos, ya que estos presentan propiedades de fotoluminiscencia modificables debido al confinamiento cuántico que se genera por su reducido tamaño, los puntos cuánticos tradicionalmente se han sintetizado a partir de Cd, con la gran desventaja de su alta toxicidad, recientemente se han buscado alternativas más verdes y más biocompatibles, como lo son los puntos cuánticos de carbono, ya que estos han mostrado interesantes propiedades optoelectrónicas, baja toxicidad, biocompatibilidad y foto estabilidad.

En el presente estudio con el fin de buscar metodologías eficientes en el desarrollo de estos materiales, se fabricaron puntos cuánticos de carbono en un proceso asistido por microondas, usando como fuente de carbono almidón, evaluando diferentes variables como la temperatura, voltaje y tiempos de reacción. Los puntos cuánticos obtenidos se caracterizaron mediante espectroscopia UV-Vis, espectroscopía de fluorescencia y espectroscopía de Raman, donde se pudo evidenciar la influencia del método de síntesis y composición de los puntos cuánticos en sus propiedades optoelectrónicas. Los puntos cuánticos de carbono mostraron propiedades de emisión en un amplio rango espectral, incluida la región visible, demostrando así que los materiales obtenidos pueden llegar a ser empleados en imagenología celular en futuros estudios.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-233-P NANOPARTÍCULAS BIMETÁLICAS DE COBRE Y HIERRO SOPORTADAS EN FIBRAS DE FIQUE COMO CATALIZADOR EN LA DEGRADACIÓN DE COLORANTES DE LA INDUSTRIA TEXTIL

Nanopartículas Bimetálicas de Cobre y Hierro Soportadas en Fibras de Fique como Catalizador en la Degradación de Colorantes de la Industria Textil

Cristian Blanco Tirado [a], Mauricio C. Cifuentes [b], Marianny Y. Combariza [c], Génesis S. Corredor*

a. *Grupo de Investigación en Fisicoquímica Teórica y Experimental, Universidad Industrial de Santander; Colombia)*

** Autor de correspondencia: genesis2180101@correo.uis.edu.co*

Palabras Claves: Procesos de oxidación avanzada (POA), Reacción Fenton, Nanopartículas (NP´s), Fibras de Fique (FF), Nanopartículas bimetálicas

El crecimiento poblacional ha llevado a una aceleración en la productividad de las diferentes actividades humanas ocasionando el desabastecimiento del principal recurso natural y que sustenta la vida, el agua. Entre las industrias más contaminantes de este recurso, la industria textil es responsable de la contaminación de al menos el 20% en total. Los colorantes que emplean en su proceso productivo son compuestos catalogados como contaminantes orgánicos persistentes (OPPs), caracterizados por presentar una alta toxicidad y ser químicamente estables lo que dificulta su total eliminación en la purificación del agua con métodos convencionales.

Los procesos avanzados de oxidación (AOP) han venido ganando cada vez mayor popularidad ya que no solo presentan una mayor eficiencia en la degradación del OPP, sino que los catalizadores empleados en estos métodos pueden ser obtenidos a partir de fuentes naturales como lo es la biomasa. La reacción Fenton es quizás el método de descontaminación de aguas residuales más ampliamente estudiado, consiste en la degradación catalítica del peróxido de hidrogeno empleando sales de hierro generando radicales hidroxilos capaces de descomponer los OPPs, en algunos casos llevándolos hasta su mineralización. El empleo de catalizadores sólidos formados a partir de nanopartículas inmovilizadas en diversos soportes de origen tanto natural como sintético, han permitido superar desventajas que el sistema catalítico homogéneo presenta como la necesidad de emplear medios de reacción altamente ácidos (pH 3), ya que en pH > 4 se favorece la formación de hidróxidos de hierro generando lodos como subproducto los cuáles son difíciles de tratar implicando un mayor costo operacional.

En este trabajo de investigación se desarrolló un catalizador heterogéneo formado por nanopartículas bimetálicas de Cu-Fe soportadas en fibras de fique para la degradación de material orgánico en un rango de pH neutro. Una solución de índigo carmín (IC) de 100 ppm se usó como colorante de referencia para evaluar actividad catalítica. Este bionanocomposito se caracterizó estructural y morfológicamente por medio de las técnicas de infrarrojo con transformada de Fourier, UV-Vis RD, DRX, SEM, TEM, etc. El monitoreo del avance en la degradación de la molécula de IC se realizó por medio de espectroscopia de UV-Vis. Se observó que en un minuto de reacción se logró la degradación del IC en un 99,29% y 97,23% a un pH de 3 y 8, respectivamente. También se comprobó que el material puede ser reutilizado por varios ciclos sin perder su efectividad catalítica. Mostrando que los bionanocompositos permiten obtener materiales altamente eficientes contribuyendo a la mejora en los procesos de descontaminación de aguas residuales.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Síntesis y caracterización de perovskitas de $LaTi_{1-X}Mn_XO_3$ (X=0-1)

Juana V Granada [a]*, **Hoover A Valencia** [a]

[a] *Universidad Tecnológica de Pereira, Escuela de Tecnología Química, Grupo de Investigación en Fotocatálisis y estado Sólido GIFES*

**Autor de correspondencia: juana.granada@utp.edu.co*

Palabras clave- Catalizadores metálicos; perovskitas; refinamiento DRX, método sol-gel

Las perovskitas de $LaTi_{1-X}Mn_XO_3$ se sintetizaron mediante el método Pechinni (sol-gel) a una temperatura de 850°C. Este método consiste en tres etapas fundamentales, en la primera etapa se solubilizaron los óxidos en forma de nitratos y se gelifica mediante una mezcla de etilenglicol y ácido cítrico en una relación 6:4. La segunda etapa comprendió un tratamiento térmico entre 300 y 350°C el cual permitió la obtención del polvillo precursor, luego se maceró hasta obtener un polvo fino y se llevó finalmente a calcinación a 850°C. Las muestras fueron llevadas a difracción de rayos X (DRX) para determinar las fases presentes (figura 1). Se determinó que el catalizador preparado con x = 0.4 obtuvo una fase pura. Este patrón se refinó por el método Rietveld usando FullProf como programa de refinamiento. El refinamiento estructural muestra que la fase cristaliza en el sistema cúbico con grupo espacial Pm3m (221) (figura 2), con parámetros de red a = 3.92322 Å. Los parámetros de ajuste en el refinamiento son: Rwp = 23.3 y x^2 = 1.32.

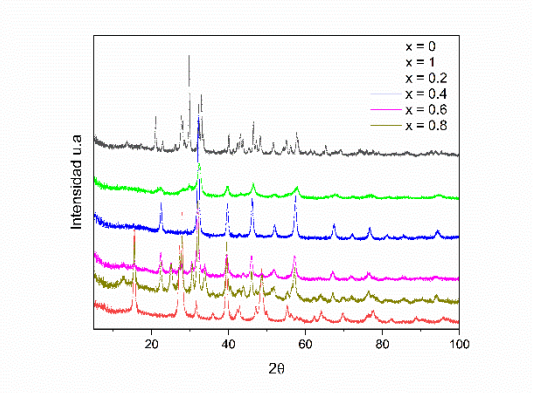


Figura 1. Patrones de difracción de polvo

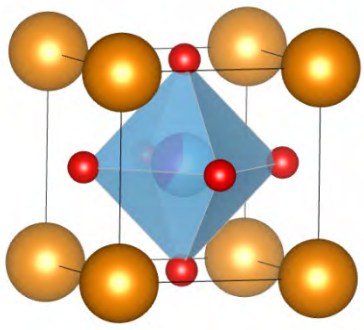


Figura 2. Diagrama de la perovskita

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-243-P ***SÍNTESIS Y ESTUDIO DE LA BIODEGRADABILIDAD DE BIOPOLÍMEROS ELABORADOS A PARTIR DE ALMIDÓN DE PAPA Y FIBRA OBTENIDA DE LA CORTEZA DEL PECIOLO DE LA PALMA DE IRACA (CARLUDOVICA PALMATA).***

Síntesis y Estudio de La Biodegradabilidad de Biopolímeros Elaborados a partir de Almidón de Papa y Fibra Obtenida de La Corteza Del Peciolo de La Palma de Iraca (*Carludovica Palmata)*

Sofía C Jurado [a]*, **Juan C Zambrano** [b], **Gabriela Misnaza** [c]

[a] *Grupo de Investigación en Bioquímica y Estudios Genéticos BIOGEN, Universidad de Nariño, Colombia.*
[b] *Grupo de Investigación en Bioquímica y Estudios Genéticos BIOGEN, Universidad de Nariño, Colombia.*
[c] *Grupo de Investigación en Bioquímica y Estudios Genéticos BIOGEN, Universidad de Nariño, Colombia.*
* *Autor de correspondencia: sofia.catalina.j@gmail.com*

Palabras Claves: Biopolímero; Palma de Iraca; Fibra de Peciolo; Almidón de Papa; Biodegradabilidad.

La palma de iraca (Carludovica palmata), también conocida como palma toquilla o jipijapa, es una planta herbácea con hojas simples, agrupadas y con láminas en forma de abanico que pueden llegar a medir hasta 65 cm de largo. La unión entre la hoja y el tallo se denomina peciolo y puede alcanzar una longitud de entre 1,5 y 5 metros. A pesar de sus múltiples usos, como alimento, techo y aislante térmico en climas cálidos, y como materia prima para artesanías en varias ciudades de Colombia, la palma de iraca es considerada un cultivo olvidado. En esta investigación se determinó el porcentaje de extractivos en la corteza del peciolo siguiendo la norma TAPPI 204 cm-97, el porcentaje de lignina utilizando la norma TAPPI 222 om-98 y el porcentaje de celulosa mediante el método de Kurshner y Hoffer, obteniendo como resultados 16,8%, 25.4% y 57.6%, respectivamente. Posteriormente, se elaboraron biopolímeros a partir de diferentes formulaciones de almidón de papa, glicerol y fibra obtenida del peciolo de iraca, siguiendo el diseño experimental de la Tabla 1. Se obtuvieron láminas de 30 cm de largo, 15 cm de ancho y menos de 0.5 mm de espesor, como se indica en la Figura 1. A continuación, se realizaron pruebas de biodegradabilidad al biopolímero, midiendo la cantidad de dióxido de carbono producido en condiciones aerobias, usando en parte como referencia a la norma ISO 17556:2019 (E). En conclusión, la Palma de Iraca tiene un potencial prometedor como fuente de materiales sostenibles y biodegradables para diversas aplicaciones, lo cual será beneficioso tanto ambiental como económicamente para los agricultores de este cultivo.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

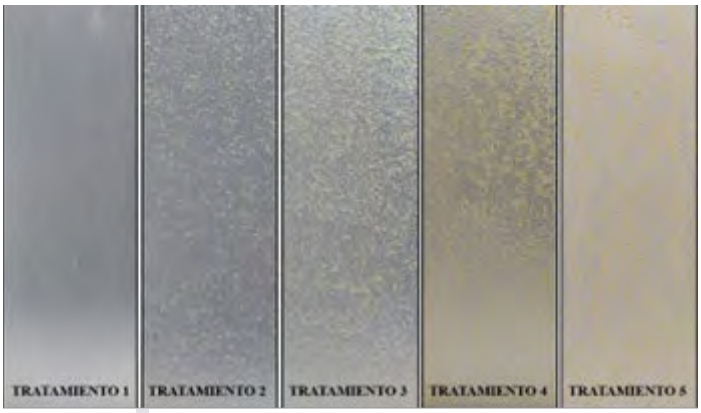


Figura 1. Laminas obtenidas de los diferentes tratamientos.

Tabla 1. Mezclas valoradas con el diseño experimental

Tratamiento	Almidón de papa (%)	Glicerol comercial (%)	Fibra de Iraca (%)
1	80	20	0
2	70	20	10
3	60	20	20
4	50	20	30
5	40	20	40

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-251-P ***EVALUACIÓN DE ELECTRODOS DE CARBÓN ACTIVADO DE CUESCO DE PALMA ACEITERA PARA LA DEGRADACIÓN DE AZUL DE METILENO DISUELTO EN AGUA IMPLEMENTANDO EL PROCESO DE ELECTRO-FENTON.***

Evaluación de Electrodos de Carbón Activado de Cuesco de Palma Aceitera Para la Degradación de Azul De Metileno Disuelto en Agua Implementando el Proceso de Electro-Fenton

Justine, J Jiménez [a], Luis, F Meza [b*], Juan, C Amezquita [c], UNIPAZ [d]

[a] *Instituto Universitario de la Paz, Colombia*
** Luis, F Meza Luis.meza@unipaz.edu.co*

Palabras Claves: Electro-fenton heterogéneo; carbón activado; electrodo; activación química; cuesco de palma

La presente investigación pretende aportar al conocimiento en la técnica de oxidación avanzada electro-fenton heterogéneo en la degradación de contaminantes orgánicos en agua, en procura de dar valor agregado a residuos agroindustriales como lo es el cuesco de palma aceitera en Colombia, elaborando electrodos a partir de este residuo para su potencial uso como cátodo en una celda electroquímica implementando el proceso electro-fenton.

Inicialmente se recolecta el cuesco de palma como subproducto del proceso de extracción de aceite en planta procesadora en Santander, el cual se somete a un proceso de modificación de sus propiedades estructurales y superficiales que consta de las siguientes etapas: Carbonización, activación química, oxidación con permanganato de potasio y finalmente impregnación con solución de cloruro de hierro.

La carbonización se llevó a cabo en una mufla a 550°C durante 30 minutos, la activación química se efectuó con ácido fosfórico al 60% en relación 2:1 en masa durante 2h, para la impregnación con hierro se implementó la técnica tratamiento hidrotermal asistido por microondas usando solución de cloruro de hierro y un prototipo de autoclave de teflón elaborado por el grupo de investigación.

Se estudian las características químicas superficiales del carbón obtenido por medio de análisis espectroscópicos tales como Infrarrojo con transformada de Fourier y Difracción de rayos X, punto de carga cero, titulaciones Boehm e isotermas de adsorción utilizando azul de metileno en disolución acuosa.

Por último, se elaboran electrodos tipo monolito de carbón activado de cuesco de palma en un prototipo de equipo de pastillaje diseñado por el grupo de investigación, estos electrodos son empleados como cátodo en una celda electroquímica para la degradación de azul de metileno en disolución acuosa por medio del proceso electro-fenton.

Como resultado parcial, se logró generar alta porosidad en el material carbonoso, con las pruebas de adsorción se logró obtener el área superficial del carbón activado y predecir su comportamiento a la hora de adsorber el azul de metileno en disolución acuosa.

Se concluye que el material carbonoso sintetizado a partir del cuesco de la palma aceitera es buen candidato como electrodo para su uso en procesos de electro-oxidación.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-256-P PUNTOS CUÁNTICOS DE CARBONO ¿UN ENREJADO POLIAROMÁTICO?: REALIDADES SOBRE SU ESTRUCTURA Y MÉTODOS DE PURIFICACIÓN

Puntos Cuánticos de Carbono ¿un enrejado poliaromático?: realidades sobre su estructura y métodos de purificación

Laura A. Rojas-Palomino [a]*, Mauricio Cerón [b], Carlos A. Martínez-Bonilla [c], Marianny Y. Combariza [d]

[a,b,d] *Centro de Estudios e Investigaciones Ambientales (CEIAM), Universidad Industrial de Santander, Colombia*
[c] *Grupo de Investigación en Nuevos Materiales y Energías Alternativas (GINMEA), Universidad Santo Tomás, Colombia*

** Autor de correspondencia: laura2228386@correo.uis.edu.co*

Palabras Claves: puntos cuánticos, carbono, cromatografía en columna., diálisis, nanomateriales, síntesis hidrotermal.

Los puntos cuánticos de carbono (CQDs), con su tamaño nanométrico y propiedades luminiscentes únicas, han demostrado un potencial prometedor en numerosas aplicaciones tales como dispositivos optoelectrónicos, sensores, celdas solares y medicina. En los CQDs, la calidad y estabilidad están estrechamente ligadas a su método de síntesis y proceso de purificación. La presencia de impurezas y defectos superficiales pueden afectar significativamente sus propiedades ópticas y electrónicas, modificando así su desempeño. En el año 2022, se publicaron más de 7000 reportes relacionados con la síntesis, caracterización y aplicación de los CQDs. En la mayoría de los reportes se describe un enrejado policondensado como estructura base sin mostrar evidencias espectroscópicas contundentes que lo sustente; incluso cuando los métodos, condiciones y sustratos de partida son diferentes, se asume la misma estructura base. Adicionalmente, el método predilecto de purificación consiste en colocar el crudo de reacción en diálisis con membranas de punto de corte entre 0.5 y 3.5 kDa. Hinterberger y col., demostraron a través de cromatografía en columna (CC) que los CQDs antes y después de la diálisis, corresponden a un conjunto de *familias* de compuestos luminiscentes diferenciados por su polaridad frente a la fase móvil. El presente trabajo busca responder algunas de las preguntas relacionadas con la purificación y caracterización de los CQDs mediante la comparación de dos técnicas de purificación: diálisis y la CC. Cada una de las fracciones obtenidas por diálisis y CC fueron caracterizadas por espectroscopia FTIR y RMN (^{1}H) revelando algunas características estructurales de las familias de compuestos separados de acuerdo con su polaridad. La diálisis puede remover únicamente los reactivos que no reaccionan y compuestos considerados como subproductos, mientras que la CC permitió identificar 6 fracciones de naturaleza semejante (espectros FTIR similares); por su lado, los espectros de RMN ^{1}H mostraron señales a campo alto propias de compuestos saturados. La fluorescencia emitida por los nanomateriales bajo luz UV (l = 365 nm) reveló diferencias significativas para cada una de las fracciones. Este tipo de análisis comparativo permite avanzar en el desarrollo

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

y la implementación de CQDs como material luminiscente promisorio para el uso en sensores químicos, brindando información sobre el proceso de purificación y aportes en la caracterización de una estructura aún por definir.



Figura 1. Resumen grafico de la síntesis y purificación de los puntos cuánticos de carbono

V-269-P ***INMOVILIZACIÓN DE PEROXIDASA DE PANICUM MAXIMUM SOBRE CARBÓN ACTIVADO PARA LA DEGRADACIÓN DE ÍNDIGO CARMÍN***

Inmovilización de Peroxidasa de *Panicum maximum* sobre Carbón Activado para la Degradación de Índigo Carmín

Diana P. Vargas-Delgadillo [a*], Angie V. Perez [a], Oveimar Barbosa [a]

[a] *Grupo de Investigación en Materiales Porosos con Aplicaciones Ambientales y Tecnológicas (GIMPOAT), Departamento de Química, Universidad del Tolima, Colombia.*

[*] dpvargasd@ut.edu.co

Palabras Claves: Carbón activado; colorante; inmovilización; peroxidasa.

Los colorantes pertenecen a un grupo de contaminantes ambientales, que se clasifican como prioritarios. Es común su presencia en vertimientos industriales, debido a que son utilizados en diferentes sectores productivos, la mayoría están reconocidos como carcinógenos y presentan alta toxicidad para diferentes procesos biológicos y una amenaza para la salud de las poblaciones[1,2]. Dentro del gran número de colorantes existentes, el índigo carmín (IC) es uno de los más usados en Colombia y con mayor presencia en aguas residuales, razón por la cual se hace necesaria la búsqueda de alternativas tecnológicas que permitan no solo la remoción de esta sustancia sino también su degradación. Se ha demostrado que las peroxidasas son enzimas con un gran poder catalítico para la degradación de colorantes, sin embargo, su uso directo en el proceso de descontaminación, resulta complejo dadas las condiciones de operación. Es el caso de la peroxidasa de *Panicum maximum* (PPM) la cual exhibe potencial para degradar IC, pero su baja estabilidad operacional limita su uso. Por tanto, la inmovilización enzimática es una estrategia viable para superar esta dificultad.

En este trabajo se prepararon carbones activados mediante la activación química de raquis de plátano (CAR) y cascara de cacao (CAC). Los materiales fueron caracterizados textural y químicamente. Para el proceso de inmovilización, los carbones activados (CAC o CAR) se mantuvieron en agitación constante con la enzima PPM, evaluando: tiempo de contacto, carga enzimática, pH y temperatura. Los parámetros ideales fueron empleados para preparar carbones activados con PPM inmovilizada (CAC-PPM y CAR-PPM), los cuales fueron usados en la degradación del IC.

Los materiales carbonosos presentaron áreas superficiales, volúmenes y tamaños de poro adecuados para la inmovilización de la enzima. 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 CAR y CAC, respectivamente. Se degradó 78.16% y 74.60% de IC empleando CAC-PPM y CAR-PPM después de 2 horas de reacción, respectivamente. En conclusión, CAR y CAC fueron materiales carbonosos con características adecuadas para inmovilizar PPM. Así mismo, los biocatalizadores obtenidos muestran potencial para degradar IC.

1. R Ananthashankar, A. G. Production, Characterization and Treatment of Textile Effluents: A Critical Review. *Journal of Chemical Engineering & Process Technology* (2013) doi:10.4172/2157-7048.1000182.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Síntesis de electrocatalizadores basados en oxihidróxidos de Fe/Ni sobre espumas de níquel para la electrólisis del agua en medio alcalino

Juan P. Chiquillo, Danna V. Salinas, Andrés Cabrera, Yazmin Agámez, Jorge E. Gómez*
Laboratorio de Investigación en Combustibles y Energía, Universidad Nacional de Colombia, Colombia
** Autor de correspondencia: joregomezlop@unal.edu.co*

Palabras Claves: Hidrógeno verde; Electrocatalizadores; Espuma de níquel; Oxihidróxidos

El hidrógeno se proyecta como el combustible del futuro y su demanda se ha triplicado desde 1975. Sin embargo, en la actualidad casi toda su producción se basa en combustibles fósiles, lo cual la convierte en una de las industrias con mayor cantidad de emisiones de CO_2 [1]. Por tal motivo, en el contexto de la transición energética, la electrólisis del agua se presenta como una alternativa limpia para la producción de hidrógeno libre de emisiones de CO_2, por lo que varios países, incluyendo Colombia, la han incluido en su ruta del hidrógeno [2]. Los electrolizadores basados en metales no-nobles como el níquel, están atrayendo la atención para la generación de hidrógeno verde a través de la electrólisis del agua alcalina usando energías renovables. El níquel es un metal resistente, abundante y de bajo costo, característica que le permite competir con los materiales actuales basados en los costosos pero muy activos metales nobles como el IrO_2 y RuO_2, para su aplicación en electrolizadores a escala industrial. Sin embargo, el níquel por si solo no es un buen electrocatalizador, requiriendo modificaciones químicas en su superficie para alcanzar buenas actividades.

En el presente trabajo se sintetizaron electrocatalizadores basados en oxihidróxidos de Fe/Ni, sobre espuma de níquel a través de una metodología simple y rápida [3]. En esta, las espumas de níquel de 1 cm^2, previamente lavadas con isopropanol en ultrasonido, son sumergidas por 5 minutos en soluciones conteniendo tiosulfato de sodio (20 mM), nitrato de hierro (88 mM) y/o una sal metal de transición como el cerio (12 mM). Luego del lavado respectivo, los materiales fueron caracterizados mediante pruebas electroquímicas (curvas de polarización y voltametría cíclica), así como diferentes análisis espectroscópicos.

En comparación con la espuma de níquel prístina, algunos materiales sintetizados mostraron mayor actividad electrocatalítica, dada la disminución en el sobrepotencial necesario para alcanzar una densidad de corriente dada en la reacción de evolución de oxígeno, haciéndolos promisorios para su uso en electrolizadores de bajo costo para la generación eficiente de hidrógeno. Sin embargo, aún es necesario realizar pruebas de durabilidad y optimizar estos materiales para lograr actividades electrocatalíticas más prácticas.

Bibliografía:

[1] A. T. Raissi y D. L. Block, "Hydrogen: Automotive fuel of the future", IEEE Power and Energy Magazine, vol. 2, n.º 6, pp. 40–45, noviembre de 2004. https://doi.org/10.1109/mpae.2004.1359020
[2] CASTIBLANCO, Orlando; CÁRDENAS, Dany José. Producción de hidrógeno y su perspectiva en Colombia: una revisión. Gestión y Ambiente, 2020, vol. 23, no 2, p. 299-311
[3] L. Yu et al., "Ultrafast room-temperature synthesis of porous S-doped Ni/Fe (oxy)hydroxide electrodes for oxygen evolution catalysis in seawater splitting", Energy & Environmental Science, vol. 13, n.º 10, pp. 3439–3446, 2020. https://doi.org/10.1039/d0ee00921k

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-341-P ***TRANSFORMACIÓN DE CARBÓN TÉRMICO COLOMBIANO EN ESTRUCTURAS FULLERÉNICAS MULTICAPAS PARA EL DESARROLLO DE SUPERCAPACITORES***

Transformación de Carbón Térmico Colombiano en Estructuras Fullerénicas Multicapas para el Desarrollo de Supercapacitores

Karen V. Hurtado [a]*, Emmanuel Villota [a], Juan M. Barraza [b], Manuel N. Chaur [a]

[a] *Departamento de Química, Universidad del Valle, Cali - Colombia*
[b] *Escuela de Ingeniería Química, Universidad del Valle, Cali - Colombia*
** Autor de correspondencia: hurtado.karen@correounivalle.edu.co*

Palabras Claves: Carbón mineral; Antracita; Fullerenos; Nanocebollas de carbono; Supercapacitores.

Colombia posee una de las mayores reservas de carbón antracita en el mundo, siendo el principal productor en América Latina y el quinto mayor exportador a nivel mundial. Este carbón posee una alta concentración de carbono fijo y una baja presencia de cenizas y azufre. Su uso principal radica en procesos de combustión, utilizados para la generación de energía termoeléctrica, debido al alto poder calorífico que contiene, sin embargo, esta fuente de energía se encuentra asociada a grandes emisiones de dióxido de carbono (CO_2). Para reducir la dependencia de estos combustibles fósiles y mitigar su impacto ambiental, es necesario buscar alternativas de uso para la antracita, que incrementen su valor agregado evitando así afectaciones al medio ambiente. Una opción prometedora se basa en el recocido térmico de carbón antracita para la formación de fullerenos multicapa, también llamados nanocebollas de carbono (CNOs). Desde su descubrimiento, han probado poseer grandes áreas superficiales, potencialmente útiles en adsorción y catálisis. Además, pueden ser funcionalizadas químicamente para expandir el rango de aplicaciones, como la detección de analitos, procesos biomédicos y en materiales para almacenamiento de carga eléctrica en sistemas capacitivos. Las CNOs comúnmente son producidas a partir del recocido térmico de nanodiamantes (NDs) ultradispersos de alto costo, provenientes de procesos de alto impacto y de difícil acceso. Por esta razón, el carbón antracita resulta ser una fuente favorable para la obtención de CNOs, resaltando que estos nanocompuestos podrían almacenar mayores densidades de corriente que los capacitores convencionales, debido a sus extensas áreas superficiales y a la interacción π-π entre sus capas. Considerando lo anterior, la síntesis de CNOs, se llevó a cabo mediante la utilización de muestras procedentes de distintas partes del país, diferenciadas en tamaños de partícula, que fueron sometidas a carbonización mediante recocido térmico a temperaturas cercanas a los 1600°C bajo atmósfera inerte. Posteriormente, las CNOs se oxidaron químicamente para evaluar su idoneidad como material de electrodo en la elaboración de capacitores de doble capa para almacenamiento de energía. Finalmente, para su caracterización se utilizaron distintas técnicas, tales como HR-TEM, LV-SEM, RAMAN, FT-IR, TGA, XPS y técnicas electroquímicas.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Síntesis de fotocatalizadores compuestos de TiO_2 y materiales grafénicos

Claudia A. Cajicá[a], Elizabeth Y. Urrea[a], Rafael Cabanzo[a], Enrique Mejía-Ospino[a]*

[a] *Laboratorio de Espectroscopia Atómica y Molecular (LEAM), Universidad Industrial de Santander, Colombia.*
** claudia.cajica@correo.uis.edu.co*

Palabras Claves: Nanomateriales, Fotocatalizador, Óxido de grafeno, Dióxido de titanio.

El dióxido de titanio (TiO_2) es el fotocatalizador más usado debido a que es un compuesto no tóxico, estable químicamente y resistente a la corrosión; aunque su uso se encuentra limitado por la rápida recombinación de los pares electrón/hueco (e/h) y su baja capacidad de absorción de luz solar. Se han llevado a cabo investigaciones con el propósito de superar estas limitaciones del TiO_2. Los investigadores han señalado que la combinación de TiO_2 con materiales grafénicos mejora la eficiencia de los procesos fotocatalíticos, que se atribuye a la capacidad de estos materiales para separar los electrones fotogenerados, lo que reduce la probabilidad de recombinación con los huecos resultantes. En este contexto, el presente estudio se enfoca en la utilización de dos materiales grafénicos: el óxido de grafeno reducido (rGO) y el grafeno oxidado selectivamente (EGO). Por esta razón, se sintetizaron los compuestos de TiO_2 con óxido de grafeno reducido (rGO/TiO_2) y con grafeno oxidado selectivamente (EGO/TiO_2). Para llevar a cabo este proceso, se emplearon métodos de síntesis hidrotérmica e in-situ (Figura 1). La caracterización de los materiales fue realizada a través de espectroscopía FTIR y UV-Vis DRS. Finalmente, se llevaron a cabo pruebas de degradación utilizando Rodamina 6G para evaluar la actividad fotocatalítica de los materiales sintetizados comprobando su efectividad y eficacia.

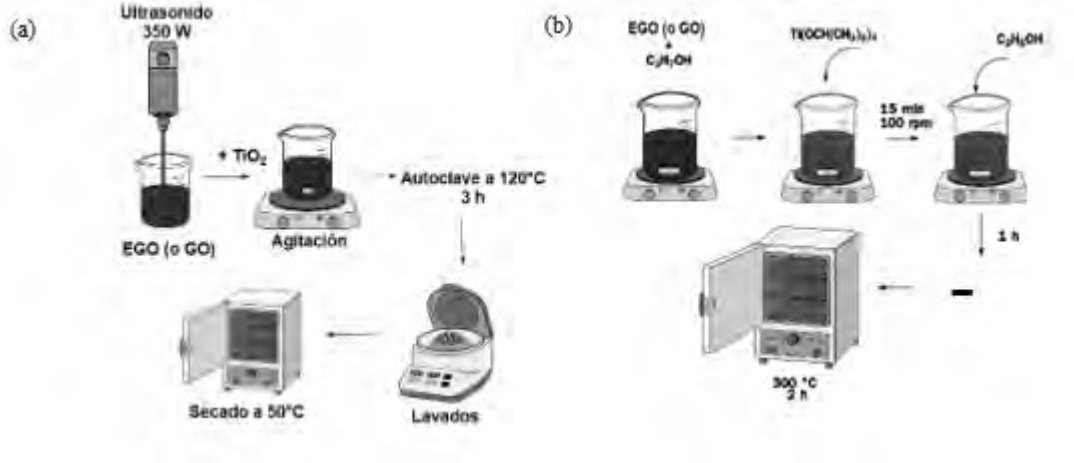


Figura 1. Esquema de la síntesis (a) hidrotérmica e (b) in-situ de materiales grafénicos y nanopartículas de TiO_2.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-350-P ***DISEÑO RACIONAL DE NANOSISTEMAS DE LIBERACIÓN SIMULTÁNEA Y CONTROLADA DE FÁRMACOS Y CURCUMINA ENFOCADOS EN EL TRATAMIENTO DE CÁNCER DE SENO***

Diseño Racional de Nanosistemas de Liberación Simultánea y Controlada de Fármacos y Curcumina Enfocados en el Tratamiento de Cáncer de Seno

Doris P. Rojas [a]*, **León D. Pérez** [a]

[a] *Grupo de Investigación en Macromoléculas, Universidad Nacional de Colombia, Colombia*
** Autor de correspondencia: doprojaspe@unal.edu.co*

Palabras Claves: Polimersoma; Curcumina; Cáncer de Seno; Nanomedicina, Nanomateriales.

Actualmente existen varias alternativas para tratar de forma adecuada y eficaz El Cáncer y es fundamental acertar con el diagnostico ya que cada tipo de cáncer requiere un tratamiento concreto. Por esta razón y después de investigar las ventajas y desventajas de los tratamientos existentes es cuando nos encontramos con la llamada Nanomedicina, específicamente la Terapia Combinada, que como bien lo dice combina más de un método de tratamiento y esto la convierte en una de las estrategias más efectivas para superar la resistencia a los medicamentos contra la enfermedad. Se han estudiado varias clases de nanosistemas o nanotransportadores para la administración de fármacos, en donde se incluyen liposomas, nanopartículas de polímeros, micelas poliméricas, dendrímeros, nanocápsulas, nanopartículas de lípidos sólidos, nanopartículas híbridas de polímeros y lípidos, nanopartículas inorgánicas, nanopartículas híbridas inorgánicas y orgánicas, nanoemulsiones y nanogeles. No obstante, estos sistemas también han presentado desventajas ya que la coencapsulación de múltiples fármacos de diversas propiedades (p. ej., solubilidad en agua, polaridad, etc.) generan inestabilidad sin mencionar su alto costo, otro ejemplo son las partículas poliméricas que solo pueden estar en un ambiente y normalmente las dosis de los múltiples fármacos en el mismo vehículo son fijas ya que, cualquier ajuste sustancial de su relación a menudo requiere una reformulación cuidadosa del nanosistema para evitar cambios indeseables de sus propiedades fisicoquímicas y estabilidad.

Por lo anterior se plantea la síntesis de vesículas poliméricas (Polimersomas) con un núcleo hidrofílico a escala nanométrica, que se forman por el autoensamble de copolímeros anfifílicos con metodologías identificadas en el grupo, pretendiendo que estas posean ventajas sobre las otras nanopartículas, como una mayor estabilidad, carga simultánea de fármacos hidrofílicos e hidrofóbicos, membrana hidrofóbica ajustable, mayor durabilidad en el ciclo de circulación sanguínea y capacidades de orientación activa y pasiva; con esto en mente el polimersoma no solo se puede cargar con fármacos sino con cualquier molécula que sea compatible con él, como por ejemplo la Cúrcuma Longa la cual ha sido estudiada en diferentes enfermedades incluyendo El Cáncer de Seno y de esta manera contribuir en la lucha contra esta enfermedad que diariamente cobre miles de vidas.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Estudio de las Propiedades Ópticas, Eléctricas y Magnéticas del Sistema (1-X) $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ – (X) $BaTiO_3$

Sebastián Rodríguez[a]*, Nicolle Tello[a], Wilson Lopera[a,b], Lorena Marín[a,b], Luis A. Rodríguez[b,c], Gustavo Zambrano[a,b], Jhon E. Ordoñez[b,c], Juan G. Ramírez[d], Andrea Esquivel[d], Julian Angel[e], Milton Manotas[f]

a. *Grupo de Película Delgadas (GPD), Departamento de Física, Universidad del Valle, Cali A.A. 25360, Colombia*
b. *Centro de Excelencia en Nuevos Materiales (CENM), Universidad del Valle, Cali A.A. 25360, Colombia*
c. *Grupo de Transiciones de Fase y Materiales Funcionales (GTFMF), Departamento de Física, Universidad del Valle, Cali A.A. 25360, Colombia*
d. *Departamento de Física, Universidad de los Andes, Bogotá 111711, Colombia*
e. *Departamento de Ciencias Básicas, Institución Universitaria Antonio José Camacho*
f. *Grupo de Investigación en Física Aplicada (GIFA), Departamento de Física y Geociencias*
** Autor de correspondencia: sebastian.bustamante@correounivalle.edu.co*

Palabras Claves: YBCO; BTO; superconductor; ferroeléctrico; band gap.

La coexistencia de diferentes propiedades en un material compuesto (MC) es un área de creciente interés científico, abriendo la puerta a nuevos fenómenos físicos y químicos **[1]**. En este trabajo, se realizó la fabricación de muestras de material superconductor de alta temperatura crítica ($YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, YBCO) con inclusiones de un material ferroeléctrico ($BaTiO_3$, BTO), específicamente, (1-X) $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ – (X) $BaTiO_3$ con X = 0.1, 0.2 y 0.3 mediante el método de reacción de estado sólido, estudiando las propiedades ópticas, superconductoras y eléctricas de los MC obtenidos. Los resultados mostraron que, usando el modelo de Kubelka-Munk, la inclusión de 3% de BTO disminuyó el band gap de 1.39 a 1.13 eV, indicando variaciones en las propiedades ópticas, observadas en su estudio UV-Vis. Además, su transición a estado superconductor ocurre en un rango mayor, incrementando hasta un 1% su temperatura crítica inicial, sugiriendo el efecto que tiene el BTO en sus propiedades superconductoras. Por otro lado, utilizando espectroscopia Raman fue posible determinar la presencia de una ligera transición estructural en la matriz de YBCO para los compositos, alterando sus cualidades superconductoras debido al cambio de fase entre su conformación ortorrómbica y tetragonal. Adicionalmente, por medio de medidas eléctricas, se confirmó que la inclusión de 3% en BTO en el MC incrementó la densidad de corriente a temperatura ambiente en un 14%, resaltando su potencial como candidato para el anclaje de vórtices magnéticos **[2]**, con implicaciones importantes en dispositivos superconductores, fotovoltaicos, espaciales y computación cuántica.

Referencias

[1] Bayraktar, E. (2017). Composite Materials. Reference Module in Materials Science and Materials Engineering (Elsavier).

[2] Rejith, P. P.; Vidya, S.; Thomas, J. K. Effect of Addition of BaTiO3 Nano Particles on the Electrical Transport Properties of YBCO Superconductor. IOP Conf Ser Mater Sci Eng 2015, 73 (1). https://doi.org/10.1088/1757-899X/73/1/012146.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-418-P ***EFECTO DEL DOPAJE QUÍMICO CON NANOPARTÍCULAS DE TIO2 EN LAS PROPIEDADES ÓPTICAS, ELÉCTRICAS Y MAGNÉTICAS DEL YBA2CU3O7- Δ***

Efecto del Dopaje Químico con Nanopartículas de TiO_2 en las Propiedades Ópticas, Eléctricas y Magnéticas del $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$

Silvana A. Palomino Forero [a]*, **Wilson Lopera Muñoz** [a]

[a] *Grupo de Películas de Delgadas (GPD), Departamento de Física, Universidad del Valle, Cali A.A 25360, Colombia*
** Silvana A. Palomino: silvana.palomino@correounivalle.edu.co*

Palabras Claves: Nanopartículas; TiO_2; Superconductor; $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$; Vórtices.

En los superconductores como el $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (YBCO) existen áreas denominadas vórtices donde la corriente eléctrica se altera debido a campos magnéticos. Estos fenómenos limitan la conductividad eléctrica sin resistencia, influenciando en la eficiencia del material. Para mejorar las limitaciones de corrientes generadas por el movimiento de estos vórtices se añaden mínimos locales de energía, o defectos, como en este caso son las nanopartículas de TiO_2, las cuales crean regiones de menor energía potencial donde los vórtices tienden a quedar atrapados. Si estos defectos tienen dimensiones similares a la separación característica entre electrones en el superconductor (alrededor de 2.7 nm para YBCO), su capacidad de inmovilizar los vórtices se vuelve aún más pronunciada. Esto es lo que se conoce como el fenómeno de flux pinning (fijación de flujo), que es esencial para la estabilidad y la aplicación de superconductores en diversas tecnologías, lo cual es el propósito de este trabajo.

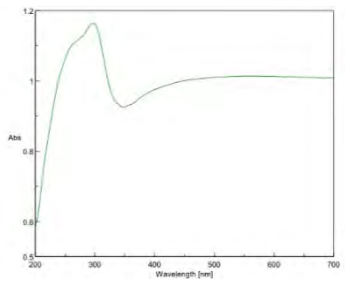


Figura.1 Distribución de tamaño de las nanoTiO_2 sintetizadas.

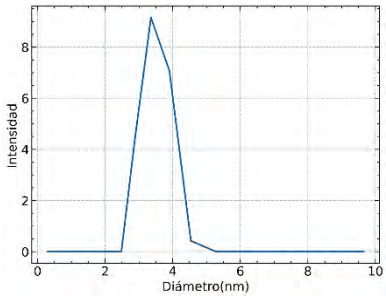


Figura.2 UV-VIS sistema nanoTiO2-YBCO.

Para cumplir con este objetivo se sintetizaron nanopartículas de TiO_2 mediante el método sol-gel, asegurando un tamaño de partícula alrededor de 2.7 nm a través de mediciones en un equipo z-sizer. (**Figura 1**). Además, se realizaron medidas UV-VIS, obteniendo una absorbancia pronunciada en la región del ultravioleta cercano (300-400 nm) y una medida FTIR donde se evidenció la vibración del enlace Ti-O alrededor de los 600 cm^{-1}. Por su lado el YBCO, se obtuvo mediante una ruta de síntesis de estado sólido y se le realizaron caracterizaciones FTIR y UV-VIS en la que se evidenció una pronunciada banda en el visible. Una medición UV-VIS del sistema YBCO-nanoTiO_2 (**Figura 2**) mostró una fuerte absorción de energía en el rango del ultravioleta y visible, demostrando una mejora en las propiedades ópticas del YBCO y la potencial aplicación en fotovoltaica de este sistema. Es importante destacar que aún quedan mediciones adicionales por realizar para profundizar en la comprensión de las propiedades ópticas, eléctricas y magnéticas; entre estas se encuentran; caracterización estructural, composicional, magnética y eléctrica por DRX, AFM, Raman, EDS-SEM, VSM, simulación solar y pruebas de impedancia en el sistema YBCO-nanoTiO2. Estas mediciones están planeadas como el paso siguiente en nuestra investigación.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-421-P ***SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE BIONANOCOMPOSITOS DE OXIDO DE COBRE Y FIBRAS DE FIQUE PARA EL TRATAMIENTO DE AGUAS CONTAMINADAS CON COLORANTES.***

Síntesis y Caracterización de Bionanocompositos de Oxido de Cobre y Fibras de Fique para el Tratamiento de Aguas Contaminadas con Colorantes.

Marianny Y. Combariza [a], Mauricio C. Cifuentes [a], Cristian Blanco-Tirado [a], Alejandro Gómez *

[a] *Grupo de Investigación en Fisicoquímica Teórica y Experimental, Universidad Industrial de Santander, Colombia.*

** Autor de correspondencia: diego2180087@correo.uis.edu.co*

Palabras Claves: Bionanocomposito, Aguas residuales, Procesos de oxidación avanzada (AOP's), Fenton, Nanopartículas (NP's), Oxido de Cobre (CuO), Fibras de Fique (FF).

Se estima que más del 80% de las aguas residuales producto de actividades humanas en el mundo son liberadas al medio ambiente sin recibir ningún tratamiento, de las cuales, la industria textil es responsable del 20% por lo que se considerada la segunda industria que más hace uso y contamina el agua. Los Procesos de oxidación avanzada (AOP's) son uno de los métodos de mayor interés usados para el tratamiento de material orgánico presente en aguas residuales enfocados en la formación de especies oxidantes altamente reactivas. Dentro de los cuales encontramos las reacciones Fenton, basadas en la oxido/reducción de $Fe^{(2+/3+)}$ y H_2O_2 para la formación de radicales libres HO□ responsables de degradación de moléculas orgánicas a través de rupturas homolíticas.

Ahora bien, dicho método requiere de un ambiente altamente ácido para ser llevado a cabo representando un factor limitante en la capacidad degradante del proceso conduciendo a la búsqueda de alternativas tal como es el caso de Yixiang Li et al (2023) quienes han trabajado en base a la capacidad redox de metales de baja valencia tales como Zn^{2+}, Co^{2+}, Ni^{2+}, Cu^{2+} y Ag^{+} para el desarrollo de sistemas Fenton no basados en hierro que permitan superar las limitaciones del método tradicional. En este trabajo, se desarrolló un bionanocomposito formado de nanopartículas de óxido de cobre (CuO) soportadas sobre una matriz de fibra de fique capaz de llevar a cabo la descomposición de colorantes presentes en aguas residuales de la industria textil mediante el proceso de oxidación avanzada de tipo Fenton heterogéneo, en un rango de pH cercano al neutro. De acuerdo a lo anterior, se llevó a cabo la síntesis mediante la coprecipitación asistida por ultrasonido de las nanopartículas de CuO sobre la superficie de las fibras de fique, FF/CuO, previamente alcalinizadas. Se encontró que poseen una capacidad de remoción superior al 95% tras un minuto de reacción en un rango de pH de 4 a 7, usando índigo carmín como colorante de referencia, siendo por lo tanto una alternativa igualmente eficaz a la reacción Fenton convencional capaz de ser llevada a pH neutro o cercano a este. Adicionalmente, el bionanocomposito fue caracterizado mediante diferentes técnicas espectroscópicas tales como DRX, UV-VIS/RD, IR-FT/ATR y SEM.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-422-P ***SÍNTESIS DE NANOMATERIALES POROSOS "METAL-ORGANIC-FRAMEWORKS" CON POTENCIAL APLICACIÓN EN LA ENTREGA DE FÁRMACOS***

Síntesis de Nanomateriales Porosos "Metal-Organic-Frameworks" con Potencial Aplicación en la Entrega de Fármacos

Juan D. Sánchez [a]*, **Andreas Reiber** [b]

[a] *Departamento de Química, Universidad de los Andes, Colombia*
[b] *Departamento de Química, Universidad de los Andes, Colombia*
** Autor de correspondencia: jd.sanchezc1@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: MOF; nanopartículas; vehículos de liberación de fármacos; cristal**.**

Se llevó a cabo una ruta satisfactoria para la síntesis del MOF MIL-100 a partir de dos sales de hierro III, cloruro de hierro III y sulfato de hierro III, y el ácido trimésico como ligando. Fue posible evitar los percances de no poder utilizar el nitrato de hierro para la síntesis, al ser un reactivo controlado, usando una solución ácida para llevar a cabo la reacción. El NH_2-MIL-101 también fue sintetizado de forma satisfactoria usando como precursor la sal de cloruro de hierro III en solución de DMF con el ligando ácido 2-aminotereftálico. Ambos procesos se llevaron a cabo bajo un sistema de reflujo. Su caracterización por espectroscopía Raman, IR y sus curvas de TGA, imágenes de SEM y análisis elemental son consistentes con lo esperado. La morfología exhibida por el NH_2-MIL-101 es muy bien definida presentando cristales en forma hexagonal. Debido a esta estructura cristalina y la capacidad de funcionalizarlo por medio de enlaces con polímeros utilizando reacciones de carácter orgánico, se propone buscar dicha alternativa para modificar la superficie de este material. Para el caso del MIL-100 no se obtuvo una estructura definida, por lo tanto, se propone realizar un proceso de "coating" y de esta manera realizar una variación a las interacciones de la superficie de este para no ser detectado por el sistema inmune.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-443-P ***SÍNTESIS ELECTROQUÍMICA DE PELÍCULAS DE POLI(3,4-ETILENDIOXITIOFENO)-POLI(ESTIRENOSULFONATO) DOPADO CON BROMURO DE TETRAETIL AMONIO Y EVALUACIÓN DE PROPIEDADES COMO MATERIAL TRANSPORTADOR DE HUECOS***

Síntesis electroquímica de películas de Poli(3,4-etilendioxitiofeno)-poli(estirenosulfonato) dopado con Bromuro de Tetraetil Amonio y evaluación de propiedades como material transportador de huecos

Lina M. Aristizábal [a*], Martín Gonzalez[b], María T. Cortes[b], Pablo Ortiz[c].

Departamento de Química, Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia.
Departamento de Ingeniería Química, Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia.
**Autor de Correspondencia: l.aristizabald@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: Celda Solar de Perovskita; Capa Transportadora de Agujeros; PEDOT:PSS; TEAB.

RESUMEN

La capa transportadora de agujeros (HTM) presente en las heterouniones de la Celda Solar de Perovskita (PSC) de arquitectura invertida, tiene como función la separación de agujeros en el interior de la celda evitando fenómenos de recombinación que pueden llevar a la perdida de propiedades eléctricas y ópticas de los dispositivos fotovoltaicos. Por consiguiente, el desempeño general de una PSC va a depender de la capacidad de transferencia de los portadores de carga dada por la capa HTM, como también de su buena alineación con los niveles de energía de la perovskita (PVK) y demás capas en la estructura de arquitectura invertida.

En este sentido, el avance en la investigación de capas HTM es de carácter primordial para la mejora en el rendimiento de PSC. Particularmente, es muy importante la disminución de la recombinación de los portadores, con el fin de promover un alto rendimiento de la celda y evitar su posterior degradación por fenómenos ambientales.

En este trabajo se investigó la síntesis electroquímica por cronopotenciometría y voltamperometría cíclica (CV) del poli(3,4-etilendioxitiofeno)-poli(estirenosulfonato) (PEDOT:PSS) bajo condiciones de codopaje con Bromuro de Tetraetil Amonio (TEAB), y se evaluaron algunas de sus propiedades optoelectrónicas para estudiar su potencial como HTM en PSC. Se evaluó la fotoluminiscencia (PL) de este polímero para caracterizar su capacidad de extraer los huecos de la capa absorbedora (PVK). También se investigó su respuesta de absorción de luz mediante espectroscopia UV-Vis, se caracterizó estructuralmente el polímero por Raman, y se evaluó su electroactividad por voltametría cíclica e Impedancia electroquímica.

Como resultado, se encontraron buenas propiedades de apagado para los HTM de PEDOT:PSS-TEAB sintetizados por cronopotenciometría. Aumentó el apagado alrededor de un 40% en comparación al PEDOT:PSS. La evaluación electroquímica y por UV-Vis permitió la identificación de los estados oxidados del PEDOT:PSS, y el reconocimiento de su nivel HOMO para una alineación de bandas con la capa de PVK efectiva. Finalmente, los resultados confirman la influencia positiva del codopaje del PEDOT con TEAB en sus propiedades como HTM por lo que abre camino para su aplicación en PSC de arquitectura invertida.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-444-P ***PREPARACIÓN DE CARBÓN ACTIVADO A PARTIR DE LODO DE POTABILIZACIÓN Y SU EVALUACIÓN EN LA ADSORCIÓN DE ANIONES INORGÁNICOS PARA MEJORAR LA EFICIENCIA DE POAS***

Preparación de carbón activado a partir de lodo de potabilización y su evaluación en la adsorción de aniones inorgánicos para mejorar la eficiencia de POAs

María C. Gelpud [a], **Luis. A. Galeano** [a], **Arsenio H. Troya** [b], **Ana M. García** [a,*]

[a] *Grupo de Investigación en Materiales Funcionales y Catálisis, Universidad de Nariño, Colombia*
[b] *Centro de Asesorías en Estadística (CEASE), Universidad de Nariño, Colombia*
* *Autor de correspondencia: anamariagarcia@udenar.edu.co*

Palabras Clave: adsorbente, nitratos, fosfatos, Procesos de Oxidación Avanzada, agua residual.

Una de las preocupaciones frente al desarrollo de los Procesos de Oxidación Avanzada (POAs), como la peroxidación catalítica en fase húmeda (PCFH), ha sido la presencia de aniones inorgánicos, los cuales en determinadas concentraciones pueden comportarse como captadores de las especies reactivas de oxígeno. Estos aniones inorgánicos pueden ser eliminados de los afluentes a tratar mediante adsorción. Por lo tanto, en el presente trabajo se describe la preparación de materiales adsorbentes tipo carbón activado a partir de lodos de potabilización (LP) provenientes de una planta de tratamiento de agua, elegidos debido a la alta cantidad de materia orgánica, hierro y aluminio que poseen.

Se prepararon 4 materiales mediante diferentes tratamientos del lodo de potabilización y se denotaron como: *(i)* LP-C: lodo de potabilización calcinado a 600°C en atmosfera de N_2 por 2 h; (*ii)* LP-A: lodo activado preparado mediante el método físico-químico de impregnación húmeda con KOH y activación física a 600°C en atmósfera de N_2; (iii) R-A: residuo de lodo de potabilización activado. Al lodo de potabilización se le realizó una extracción previa para separación de hierro y aluminio, el residuo obtenido fue activado al igual que LP-A; *(iv)* Al/Fe: aluminio/hierro extraídos de LP: Los metales extraídos fueron precipitados con NaOH a pH 8. El material se calcinó a 600 °C.

Todos los materiales fueron caracterizados fisicoquímicamente mediante técnicas como: espectroscopia infrarroja en modo de reflectancia difusa (DRIFTS), análisis térmico simultaneo (TGA/DSC), espectroscopía ultravioleta visible por reflectancia difusa (DR-UV-Vis), espectroscopía de absorción atómica (EAA), fluorescencia de rayos X (FRX), determinación del punto de cero carga (pHpzc) y determinación de propiedades texturales a partir de la isoterma de adsorción de N_2. Finalmente, para la determinación de la capacidad de adsorción de cada material, se preparó una muestra de aniones (Fl^-, Cl^-, NO^{3-}, SO_4^{2-}, PO_4^{3-}) teniendo en cuenta las concentraciones reportadas para aguas residuales en la ciudad de Pasto, Nariño. El seguimiento de la concentración de aniones se realizó mediante cromatografía iónica. El material Al/Fe, presentó una mayor capacidad de adsorción para los aniones fosfato (163 mg/g) y sulfato (588 mg/g) con un porcentaje de remoción 30 y 56 % respectivamente.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-450-P ***SÍNTESIS Y EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD CATALÍTICA DE NANOPARTÍCULAS DE MAGNETITA, MODIFICADAS CON JUGO DE PSEUDOTALLO DE PLÁTANO Y PALADIO (II) EN LA REDUCCIÓN DE 4-NITROFENOL***

Síntesis Y Evaluación De La Actividad Catalítica De Nanopartículas De Magnetita, Modificadas Con Jugo De Pseudotallo De Plátano Y Paladio (II) En La Reducción De 4-Nitrofenol

Juan J. Londoño[A], Cristian C. Villa[A], Anderson Guarnizo Franco[B]*

[A] Programa de química facultad de ciencias básicas, Universidad del Quindío, Colombia
[B] Departamento de química facultad de ciencias, Universidad del Tolima, Colombia
*Autor de correspondencia: aguarnizof@gmail.ut.edu.co

Palabras clave: química verde; biosorción; nanoquímica, bioremediación, descontaminación

La química de nanomateriales ha entrado en auge en los últimos años, llevando a un incremento en la investigación de estas áreas para distintas aplicaciones debido a su gran versatilidad, justificado por varias propiedades de estos materiales. En este estudio se desarrolló un material bajo una metodología conceptualmente verde para obtener nanopartículas de magnetita (MNPs) modificadas con el jugo de pseudotallo (JP). La caracterización de los híbridos magnetita@JP-Pd(II) se realizó con microscopia electrónica de transmisión (TEM), microscopia electrónica de barrido (SEM), análisis termogravimétrico (TGA), espectroscopia de rayos X de dispersión energética (EDS), absorción atómica (AA), y espectroscopia infrarroja de transformada de Fourier (FTIR), para revelar la naturaleza nanométrica del nuevo compuesto. Las MNPs demostraron ser capaces de capturar iones de paladio(II) y actuar como catalizador en reacciones de reducción de 4-Nitrofenol (4-NP) a 4-aminofenol, siendo esta una metodología que no involucra solventes peligrosos o dañinos para el medio ambiente. Este nanohíbrido tiene un potencial uso en la biorremediación para el manejo de contaminantes orgánicos del agua.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-470-P ***SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN ELECTROQUÍMICA Y PROPIEDADES DE ALMACENAMIENTO DE CARGA EN PELÍCULAS DE POLINDOL DEPOSITADAS SOBRE SUSTRATOS DE ORO***

Síntesis, Caracterización Electroquímica y Propiedades de Almacenamiento de Carga en Películas de Polindol Depositadas sobre Sustratos de Oro

Manuela S Páez [a*], **María T Cortés** [b]

[a] *Departamento de Química, Laboratorio de Electroquímica y Materiales Poliméricos, Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia*
** Autor de correspondencia: m.paezs@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: polindol; polimerización oxidativa; voltamperometría cíclica; polímero conductor.

El polindol (PIn) ha surgido como un material polimérico de gran interés al ser capaz de almacenar energía, esto se atribuye a su alta actividad redox, estabilidad térmica y electroquímica. Sin embargo, uno de los desafíos es obtener el PIn en solventes orgánicos y medios ácidos (pH -0,456) empleando métodos electroquímicos. Por lo cual se propuso el desarrollo de una ruta simple de síntesis electroquímica, basada en la técnica de voltamperometría cíclica (CV) utilizando el $HClO_4$ como electrolito para la producción de PIn/ClO_4^- en solución de acetonitrilo. Considerando la interacción entre los monómeros de indol y los aniones ClO_4^-, se desarrolló la síntesis utilizando un barrido de potencial oxidativo entre -0,8 y 1,8 V durante 50, 75 y 100 ciclos a 100 mV/s sobre la solución de polimerización. A partir de la síntesis electroquímica fue posible establecer que el polímero posee propiedades electroactivas, las cuales favorecen potenciales de reducción y oxidación que dan lugar a voltamperogramas con cinética pseudoreversible.
En este caso se buscó estudiar el efecto del grosor de las películas de polindol sobre sus características electroquímicas, por lo cual los depósitos fueron caracterizados empleando CV en una solución acuosa de KCI 1 M. Allí se estableció la dependencia de las propiedades capacitivas con la velocidad de barrido, considerando las velocidades de 5 mV/s, 50 mV/s, 100 mV/s, 200 mV/s y 300 mV/s. Se comprobó que a medida que aumenta la velocidad de barrido el potencial catódico experimento un desplazamiento y la carga de polimerización fue significativamente mayor. Las morfologías del polindol se caracterizaron por medio de SEM y Raman, mientras que la capacitancia específica se determinó empleando GCD respecto a cada espesor. Al considerar una densidad de corriente de 0,5 mA/cm^2 se identificaron capacitancias específicas de 78 F/g, 585 F/g y 799 F/g para 50, 75 y 100 ciclos de polimerización respectivamente. En este sentido, la electrodeposición de alta eficiencia del PIn/ClO_4^- en medio acido es un candidato prometedor como material de electrodo para la aplicación del polindol en supercondensadores.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Síntesis de Películas Biopolimericas a Partir de un Subproducto Industrial

Bryan A Sanmiguel [a]*, Nora E Valderruten[b], Manuel N. Chaur [a]

[a] *Departamento de Química, Universidad del Valle, Colombia*
[b] *Departamento de Ciencias Farmacéuticas y Químicas, Universidad ICESI, Colombia*
** Autor de correspondencia: Bryan.sanmiguel@correounivalle.edu.co*

Palabras Claves: Quitosano; biopolímeros; bioplástico; biodegradable

El ácido cítrico es el ácido orgánico más importante en la producción de diversos productos en la industria de alimentos y farmacéutica, su síntesis se realiza mediante el uso del hongo *Aspergillus niger*. Sin embargo, una vez ha terminado el ciclo de manufactura, el hongo pierde su valor comercial y se convierte en un subproducto para la compañía encargada de la elaboración del ácido. Actualmente, parte de la biomasa producida se comercializa como alimento para rumiantes, no obstante, la cantidad producida es muy grande. Por lo tanto, el propósito de este trabajo consiste en darle un valor agregado a la biomasa generada en la biosíntesis del ácido cítrico (micelio de *Aspergillus niger)* mediante la extracción y caracterización de los biopolímeros que componen la pared celular del hongo, además de la síntesis y caracterización de películas para su posterior caracterización. Los métodos empleados consisten en la extracción de los biopolímeros a través de hidrolisis ácido-base y la síntesis de películas mediante *solvent casting*. Adicionalmente, tanto para los biopolímeros como para las películas, se emplearon técnicas de caracterización como espectroscopía infrarroja con transformada de Fourier (FTIR), titulación potenciométrica, viscosimetría capilar, análisis termogravimétrico (TGA), calorimetría diferencial de barrido (DSC). Por otro lado, se evaluó su solubilidad en medio acuso y biodegradabilidad.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-483-P ***ESTUDIO DE PELÍCULAS DE TITANIO-PLATA EN DIFERENTES CONFIGURACIONES PARA APLICACIONES PROTECTORAS EN DISPOSITIVOS BIOMÉDICOS***

Estudio de Películas de Titanio-Plata en diferentes configuraciones para Aplicaciones Protectoras en Dispositivos Biomédicos

Sebastián Mina[a], Sandra P. Castro[a]*, Luz Dary Caicedo[b], Franklin Bermeo[c]

[a]Grupo de Investigación en Electroquímica y Medio Ambiente.
[b]Grupo de Investigación Micología.
.[c]Grupo de Investigación en Física, Estadística y Matemáticas.
Facultad de Ciencias Básicas. Universidad Santiago de Cali.
Campus Pampalinda Calle 5 # 62-00. Santiago de Cali. Colombia
** Autor de correspondencia: sandra.castro00@usc.edu.co*

Palabras Claves: Recubrimientos; magnetrón sputtering; dispositivos biomédicos; mojabilidad; actividad antimicrobiana.

La búsqueda de recubrimientos que prolonguen la vida útil de dispositivos biomédicos es de interés, siendo el titanio de gran relevancia por su inocuidad y baja reactividad. Este estudio hace aportes a la investigación de películas de Ti/Ag en diferentes configuraciones (mono y multicapas), depositadas por magnetrón sputtering. Se implementa la técnica de gota sésil para estudiar la mojabilidad, obteniendo una mayor penetrabilidad en las películas donde se dispone como capa externa Ag, confiriendo alta eficiencia en la adherencia celular.

Las propiedades morfológicas se caracterizaron mediante microscopia de barrido electrónico (SEM), evidenciando sobre la superficie núcleos porosos en el revestimiento de Ag y cristales embebidos en la película de Ti. Las propiedades estructurales se estudiaron mediante difracción de rayos X, revelando la presencia de TiO_2 en fase cristalina de anatasa en una proporción del 49.9% y con la plata forma una red cúbica centrada en las caras. Las curvas de polarización Tafel demuestran densidades de corriente de corrosión en Ag/Ti/Ag/Ti/Ag/Ti, Ti/Ag y Ag con 0.1749, 0.4802 y 2.044 $nA*cm^{-2}$ respectivamente. La actividad antimicrobiana se evaluó frente a bacterias *Pseudomonas aeruginosa, Bacillus subtilis* y las levaduras *Cándida krusei*, *Cándida albicans*, los resultados establecen que los recubrimientos de Ti/Ag y Ag/Ti/Ag/Ti/Ag/Ti exhiben aplicaciones prometedoras como material biomédico

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

V-496-P ***SÍNTESIS DE UN NANOFLUIDO MAGNÉTICO DE ÓXIDO DE GRAFENO Y SU EFECTO SOBRE LAS PROPIEDADES INTERFACIALES ROCA-FLUIDO EN LA RECUPERACIÓN MEJORADA DE PETRÓLEO***

Síntesis de un Nanofluido Magnético de Óxido de Grafeno y su Efecto Sobre las Propiedades Interfaciales Roca-Fluido en la Recuperación Mejorada de Petróleo

Nelson Gutiérrez [a,b*], **Rafael Cabanzo** [a], **Nicolas Santos** [b], **y Enrique Mejía-Ospino** [a,b]

[a]*Laboratorio de espectroscopia atómica y molecular (LEAM), Universidad industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia*
[b]*Grupo de investigación en tomografía (GIT), Universidad industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia*
autor de correspondencia: nelson2188232@correo.uis.edu.co

Palabras calves: óxido de grafeno; magnetita; nanofluido; tensión interfacial; recobro mejorado

Los petróleos crudos de naturaleza pesada y extrapesada presentan desafíos sustanciales en los procesos de extracción y transporte debido a propiedades como alta viscosidad, limitada fluidez y composición altamente compleja. A esto se añade la particularidad de que algunos sistemas roca-fluido muestran una marcada afinidad por el aceite. Este fenómeno obstaculiza el flujo eficiente del petróleo a través de los poros tanto en el yacimiento como en las tuberías de conducción, lo que consecuentemente disminuye el rendimiento de extracción y amplifica los costes operativos asociados.

Con base en esta problemática, se ha buscado mejorar las propiedades de los crudos pesados y facilitar su explotación. Desde la modificación del petróleo hasta la manipulación del entorno en el que se encuentra mediante agentes químicos o físicos. En línea con esta perspectiva, el objetivo principal de la presente investigación fue la síntesis de nanofluidos acuosos utilizando nanopartículas de magnetita soportadas en óxido de grafeno (Fe_3O_4@GO). La obtención de estos nanofluidos se verificó a través de técnicas como DRX, SEM, FTIR, DLS y UV-Vis.

Posteriormente, se evaluó la influencia de estos nanofluidos en la tensión interfacial del petróleo-agua. Los resultados demostraron una reducción significativa en la tensión interfacial en relación con la concentración del nanofluido, alcanzando valores tan bajos como ~3 mN/m² con una concentración de tan solo 150 ppm. Paralelamente, mediante ensayos de modificación de la mojabilidad al agua utilizando una muestra de roca aflorante con un ángulo de contacto aproximado de 70°, se pudo establecer que, después de sumergir la muestra en el nanofluido con una concentración de 1000 ppm de Fe3O4@GO durante un período de 10 minutos, se produjo un cambio favorable hacia una mayor afinidad con el agua. Esto se evidenció en la disminución de los ángulos de contacto, llegando a valores de alrededor de ~40°, y con tiempos de estabilización de 80 segundos, se lograron ángulos inferiores a 10°.

En conjunto, los resultados obtenidos permitieron concluir que este nanomaterial tiene un impacto significativo en el mejoramiento de las condiciones del yacimiento, lo que potencialmente podría traducirse en un aumento en el factor de recobro del petróleo.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA INDUSTRIAL, TECNOLOGÍA E INNOVACIÓN

XI-131-P NANODISPERSIONES ACUOSAS PARA SU USO COMO PIGMENTOS CERÁMICOS

Nanodispersiones acuosas para su uso como pigmentos cerámicos

Maria Eugenia Parra Rodríguez[a], María del Pilar Sánchez Garzón[b], Guillermo Salamca Grosso[a], Anderson Guarnizo Franco[a]*

[a] *Universidad del Tolima (Col), Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Grupo de Investigación en Materiales Activos*
[b] *Universidad del Tolima (Col), Facultad de Ciencias Humanas y Artes, Departamento de Artes plásticas, Grupo de Investigación en Materiales Activos*

**aguarnizof@ut.edu.co*

Palabras Claves: vidriado; óxidos metálicos; química verde; nanopartículas.

Resumen

Se han ensayado dos clases de pigmentos nanoestructurados, dispersables en agua, para ser utilizados en la coloración bajo esmalte de un sustrato cerámico. El primero consiste en nanopartículas de oro estabilizadas con citrato (Au@ct) y el segundo son nanopartículas de magnetita modificadas con ácido tánico (Fe_3O_4@AT). Los pigmentos se caracterizaron por microscopía electrónica de barrido (SEM) y de transmisión (TEM), espectroscopía infrarroja con transformada de Fourier (FT-IR), análisis termogravimétrico (TGA). Los pigmentos se dispersaron en agua y se aplicaron sobre una pasta cerámica comercial, que luego fue recubierta con dispersión de óxido de silicio para el vidriado a 1100 °C. La coloración final se analizó mediante el técnicas de cromaticidad para los parámetros del sistema CIELab y la estabilidad por inmersión en álcali a pH de 10 y ácidos inorgánicos a pH 2. Los pigmentos evaluados presentaron elevada estabilidad a la temperatura de sinterizado y su color permanece inalterado frente al ataque por ácidos y bases.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XI-305-P ***CUANTIFICACIÓN DE LOS AMINOÁCIDOS L-PROLINA Y TRANS – 4 – HIDROXY – L – PROLINAS PRESENTES EN MATRICES COLAGÉNICAS PARA EVALUAR LA CORRELACIÓN DE ESTAS VARIABLES EN EL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE GELATINA HS.***

Cuantificación de los aminoácidos L-prolina y trans – 4 – Hidroxy – L – prolinas presentes en matrices colagénicas para evaluar la correlación de estas variables en el proceso de producción de gelatina HS.

Cesar A Ossa [a], Liliana Lellesch [b], Víctor A García [b], Leidy Y Vargas [b], Estefanía Rojas [b], Daniela Parra [b], Gonzalo Taborda [a], Milton Roseo Moreano [a]*

[a] Unidad de Investigación, Desarrollo e Innovación. Productora de Gelatina SAS. Parque industrial Juanchito. Manizales, Caldas.
[b] Grupo de Investigación de Cromatografía y Técnicas Afines (GICTA) Universidad de Caldas. Manizales, Caldas.

Milton Roseo Moreano *milton.rosero@ucaldas.edu.co

La gelatina es un biomaterial versátil ampliamente utilizado en diversas industrias debido a su multifuncionalidad y origen en residuos industriales. Su aplicación en alimentos y farmacéutica se debe principalmente a su biocompatibilidad, no toxicidad y degradabilidad. Actualmente se utiliza en aplicaciones biomédicas y para administración de compuestos de interés para el tratamiento y prevención de enfermedades donde se evidencian oportunidades de mejorar en relación con la pérdida de propiedades de la gelatina y la liberación inadecuada de los compuestos debido a factores como temperatura, humedad y pH. El objetivo general de este estudio fue realizar un análisis exhaustivo de muestras de gelatina con aplicación farmacéutica, sometidas a pruebas de estabilidad acelerada y a atmosferas modificadas con compuestos químicos, simulando condiciones extremas de almacenamiento, con el fin de determinar la composición de aminoácido libres y totales, y su relación con la disolución. Para este estudio se desarrolló un método para el análisis de aminoácidos totales en gelatina mediante la aplicación de HCl 6M y agua tipo I, seguido de la derivatización con NBD-Cl. El análisis se realizó por cromatografía liquida de alta eficiencia, utilizando fases móviles Buffer acetato/MeOH/THF (900/95/5) y MeOH a una longitud de onda de 230 nm con un flujo de 1.0 mL/min, con inyección de 20 µL y un tiempo de análisis de 20 min. El estudio dio a conocer la concentración de L - prolina (3.6 mg/kg) e hidroxiprolina (1.2 mg/kg) que se encuentran libre en la matrices colagénicas estudiadas, así como la concentración total de L- prolina (75.32) y trans – 4 – Hidroxy – L - prolina (165.46 mg/kg) en la misma matriz. En conclusión, el método desarrollado permite la cuantificación de los aminoácidos prolina e hidroxiprolina en una matriz de gelatina con aplicación farmacéutica.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Regulación y Riesgos Asociados a los Nanomateriales: Aplicación y Contexto Colombiano

Judith F Mojica[a*], Juan F López[b]

[a]*Grupo de investigación en Recursos Energéticos y Materiales (GIREM), Universidad Francisco de Paula Santander, Colombia*
[b]*Grupo de investigación en Recursos Energéticos y Materiales (GIREM), Departamento de Química, Universidad Francisco de Paula Santander, Colombia*
**Autor de correspondencia: judithfernandamj@ufps.edu.co*

Palabras claves: nanomateriales; riesgos; normatividad; toxicología.

Ante el descubrimiento de las propiedades características de los nanomateriales (NMs) para novedosos fines, el crecimiento en el mercado es cada vez más significativo, generando preocupación debido a que el control de los posibles riesgos según los peligros propios de su naturaleza química a nivel de regulación es escaso y no está globalizado. De esta manera, en esta investigación inicialmente se llevó a cabo una caracterización de diferentes empresas en Colombia mediante un instrumento de recopilación de información, con el cual se identificaron NMs (figura 1a) que son fabricados en la industria colombiana o importados para su incorporación en procesos de manufactura nacional. Seguidamente, se aplicó un proceso de selección de los NMs comercializados en función de la disponibilidad de documentos técnico-científicos, lo cual permitió la consulta específica de literatura de NMs del sector odontológico, pinturas, alimentos y fertilizantes. La revisión sistemática sobre evidencias de riesgos se enfocó en nanopartículas (NPs) de dióxido de silicio (SiO_2) y dióxido de titanio (TiO_2) prístinas, empleando diferentes motores de búsqueda de información científica. Un primer paso fue el reconocimiento y adaptación de las metodologías estándar como las normas del comité técnico 229 de nanotecnología de la Organización Internacional de Normalización (ISO) y/o las guías de la Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económicos (OCDE) para la determinación de los efectos tóxicos en estudios in vivo e in vitro, cuyos resultados de las consultas avanzadas atendieron a pruebas específicas de las matrices de análisis, discrepando con las publicaciones de organizaciones internacionales propias para NMs. Tanto las NPs de SiO_2 como las de TiO_2, han sido reportadas en distintos trabajos de toxicología (figura 1b) revelando su impacto al medio ambiente (ensayos en peces, crustáceos, plantas acuáticas, etc) y a la salud humana (ratones y cultivos celulares). La generación y transferencia de conocimiento sobre las consecuencias de uso y manipulación de estas NPs se convierte en una estrategia de concientización, precaución y toma de decisiones oportunas a fin de desarrollar herramientas de mitigación para la exposición ocupacional y la del consumidor, constribuyendo a una gestión integral desde la implementación adecuada del sistema globalmente armonizado.

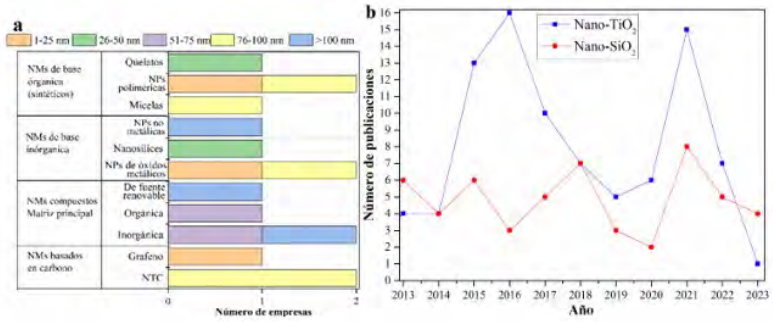


Figura 1. a. Nanomateriales identificados en las empresas caracterizadas. **b**. Comportamiento del número de investigaciones sobre los riesgos de los nanomateriales seleccionados

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA INORGÁNICA

II-135-P IMPLEMENTACIÓN DE LA METODOLOGÍA DE DIGESTIÓN PARA ANÁLISIS POR ICP-MS EN EL ESTUDIO DE LANTÁNIDOS, ITRIO Y ESCANDIO PRESENTES EN CENIZAS DE CARBÓN

Implementación de la Metodología de Digestión para Análisis por ICP-MS en el Estudio de Lantánidos, Itrio y Escandio Presentes en Cenizas de Carbón

Diego Bustos[a]*, Elva M Robayo[a], Alicia Montes[a], Edith J Muñoz[a]

a. *Grupo de Trabajo Geoquímica Orgánica, Servicio Geológico Colombiano, Colombia*
** Diego Bustos: dbustos@sgc.gov.co*

Palabras Claves: ICP-MS; tierras raras; digestión de cenizas de carbón.

Los lantánidos, itrio y escandio (REY) en la industria energética son muy importantes gracias a sus aplicaciones en energía limpia, productos de consumo y defensa nacional. En este trabajo se avalúa el pretratamiento de muestras de carbón y ceniza de carbón, y se realizan digestiones por tres diferentes métodos analíticos (ASTM D6357-21b, multiácido, bomba cerrada) para el posterior análisis químico de REY por ICP-MS, utilizando el material de referencia certificado NIST 1633c (Tabla 1).

	NIST 1633c Valor certificado	Interlab ASTM D6357-21 *	Multiácido		Bomba cerrada		ASTM D6357-21	
			$\bar{X}$	S	$\bar{X}$	S	$\bar{X}$	S
Ce	180 ª	186,894	202,400	2,011	179,040	0,611	190,320	1,766
Dy	18,7 ± 0,30 ᵇ	18,982	18,200	0,226	16,806	0,472	18,508	1,989
Er	-		10,310	0,152	10,864	0,263	11,869	1,227
Eu	4,67 ± 0,07 ᵇ	4,658	5,088	0,063	5,755	0,056	5,760	0,528
Gd	-		21,490	0,256	21,866	0,278	23,326	2,171
Ho			3,634	0,050	3,375	0,093	3,737	0,397
La	87 ± 2,6 ᵇ	83,628	80,510	1,102	76,142	0,979	77,870	7,222
Lu	1,32 ± 0,03 ᵇ	1,315	1,239	0,024	1,259	0,032	1,388	0,142
Nd	87 ª	91,389	88,140	1,423	85,064	0,913	88,884	9,257
Pr	-		22,980	0,294	21,170	0,113	21,532	2,097
Sc	37,6 ± 0,6 ᵇ	39,299	28,610	1,016	35,136	0,540	165,980	6,602
Sm	19 ª	20,711	20,120	0,361	18,744	0,261	19,894	2,108
Tb	3,12 ± 0,06 ᵇ		3,389	0,043	3,848	0,070	4,124	0,417
Tm	-		1,377	0,021	1,289	0,028	1,433	0,151
Y	-		77,230	2,165	92,800	2,146	88,954	10,848
Yb	7,7 ª	8,978	9,062	0,135	8,626	0,171	9,433	0,968

ª Valores de información en el certificado
ᵇ Valores de referencia en el certificado
* los datos corresponden a los valores obtenidos en estudio interlaboratorio del MRC NIST 1633c.
$\bar{X}$ Los datos corresponden a 5 repeticiones del MRC NIST 1633c
Nota: Los resultados presentados hacen referencia a la cantidad inicial de ceniza. El método de bomba cerrada no requiere calcinación (500 °C)

Tabla 1. Resultados REY (ppm) por tres metodologías de digestión y determinación en ICP-MS

Teniendo en cuenta los resultados de los métodos de digestión usados, se observaron diferencias estadísticamente significativas entre estos. La eficiencia en el proceso de digestión también se tuvo en cuenta, donde el método multiácido presentó mejor comportamiento. Con el método multiácido se obtuvo la mayor eficiencia de digestión entre los procedimientos evaluados. Los resultados del método ASTM tienen alta dispersión y el método de bomba cerrada es ineficiente, debido al elevado consumo de ácidos, mayores etapas del proceso y tiempo requerido.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

II-137-P ***USO POTENCIAL DEL ÁCIDO SILICOTÚNGSTICO COMO CATALIZADOR EN LA OBTENCIÓN DE BIODIESEL A PARTIR DEL ACEITE DE AGUACATE PERSEA AMERICANA MILL VARIEDAD LORENA.***

Uso Potencial del Ácido Silicotúngstico como Catalizador en la Obtención de Biodiesel a partir del Aceite de Aguacate *Persea americana* Mill Variedad Lorena.

Nelson Contreras[a]* , Juan P Arias[a], Lina M Orozco[b] , Nathalia Cardona[a]

[a] *Grupo de Investigación Oleoquímica, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia*
[b] *Grupo de Investigación Polifenoles, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia*

**Autor de correspondencia: ncontrer@utp.edu.co*

Palabras Claves: Ácido Silicotúngstico; Aguacate, Catalizador homogéneo; Transesterificación.

En Colombia se pierde aproximadamente un tercio de la producción total de alimentos, el equivalente a 9.76 millones de toneladas. La mayor cantidad de estas pérdidas se registra en frutas y vegetales (62%) y en raíces y tubérculos (25%); pérdidas que se concentran en la etapa de producción principalmente (40.5%). En cuanto a aguacate se refiere, hay que tener en cuenta que desde que se separa el fruto de la planta, es susceptible de sufrir daños mecánicos, fisiológicos y biológicos. Estos factores inciden en la disminución de la calidad, del precio y ocasionan pérdidas que pueden llegar hasta el 100% de la fruta. Después del aprovechamiento del fruto del aguacate, se generan residuos como la semilla y la piel del fruto. Sin embargo, aunque la semilla representa un alto porcentaje del fruto, la investigación sobre su aprovechamiento se encuentra aún en etapas iniciales, ya que es un recurso escasamente usado; no obstante, este y otros residuos secundarios se pueden valorizar mediante la obtención de aceite de pulpa y de semilla y su transformación en diferentes productos con usos potenciales.

En este orden de ideas, el objetivo de este proyecto fue estudiar el ácido silicotúngstico como potencial catalizador de la reacción de transesterificación del aceite de aguacate variedad Lorena en la obtención de biodiesel. Se evaluaron diferentes condiciones catalíticas como concentración del catalizador, tiempo de reacción y temperatura de reacción. El progreso de la reacción se monitoreó continuamente tomando alícuotas en intervalos de una hora y analizándolas por CG/EM para identificar los productos formados calculando parámetros catalíticos como la conversión y la selectividad. Según los resultados obtenidos, las mejores condiciones catalíticas fueron: concentración de catalizador 2 mol %, tiempo de reacción 3 horas y temperatura de reacción 60 °C; además, se presentó una conversión del 99% del ácido oleico. En este sentido, este trabajo se puede emplear como una estrategia catalítica para la adecuada obtención de biodiesel a partir de residuos agroindustriales, con lo cual se puede contribuir al desarrollo sostenible y mejorar la competitividad del sector agroindustrial colombiano.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

II-138-P ***OBTENCIÓN DE BIODIESEL A PARTIR DEL ACEITE DE AGUACATE PERSEA AMERICANA MILL. VARIEDAD LORENA EMPLEANDO ÁCIDO FOSFOTÚNGSTICO COMO CATALIZADOR***

Obtención de Biodiesel a partir del Aceite de Aguacate *Persea americana Mill.* Variedad Lorena empleando Ácido Fosfotúngstico como catalizador.

Nelson Contreras[a]* , Juan J Flórez[a], Lina M Orozco[b] , Nathalia Cardona[a]

[a] *Grupo de Investigación Oleoquímica, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia*
[b] *Grupo de Investigación Polifenoles, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia*

**Autor de correspondencia: ncontrer@utp.edu.co*

Palabras Claves: Ácido Fosfotúngstico; Aguacate; Heteropoliácido; Transesterificación.

Uno de los principales atractivos del biodiesel es que puede obtenerse a partir de cualquier materia prima rica en triglicéridos, lo que hace que la fuente de recursos sea prácticamente inagotable. Aunque se han empleado diversas materias primas (grasas animales, aceites usados), la fuente más utilizada es el aceite vegetal extraído de semillas oleaginosas. En general, los frutos de muchas plantas pueden ser usados como material de partida; un ejemplo es la utilización de material residual de las semillas y pulpa del aguacate. Este fruto ha presentado en la última década un incremento progresivo en los volúmenes de producción. Sin embargo, un volumen de producción apreciable se pierde por causas como la sobremaduración, las plagas y los defectos en la calidad del fruto. Todos estos factores tienen un gran impacto ambiental asociado a la generación de residuos agrícolas, que se traduce también en pérdidas económicas y baja eficiencia productiva del sector agroindustrial.

Con el objetivo de generar un aprovechamiento de los residuos agroindustriales asociados al aguacate, se estableció el potencial del ácido fosfotúngstico $H_3PW_{12}O_{40}$ (HPW) como catalizador en la obtención de biodiesel a partir del aceite de aguacate *Persea americana* Mill variedad Lorena. Por tanto, se evaluaron diferentes condiciones catalíticas como concentración del catalizador (0, 0.5, 1, 1.5 y 2mol%), el tiempo (1, 2, 3 y 4 horas) y temperatura de reacción (40, 50 y 60 °C), en la reacción de transesterificación. El progreso de la reacción se monitoreó continuamente tomando alícuotas en intervalos de una hora y analizándolas por CG/EM para identificar los productos formados y calcular parámetros catalíticos como la conversión y la selectividad. Según los resultados obtenidos, las mejores condiciones catalíticas fueron 2 mol %, 3 horas y 60 °C; además, se presentó una conversión del 99% del ácido oleico. En este sentido, esta investigación se puede emplear como una estrategia catalítica para la adecuada obtención de biodiesel a partir de residuos agroindustriales, y así mismo contribuir al desarrollo sostenible y mejorar la competitividad del sector agroindustrial colombiano.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

II-139-P SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE COMPUESTOS DE COORDINACIÓN DE CU Y SN DERIVADOS DE LOS ISÓMEROS META Y PARA DE (N,N-DIBENCILBENCENODIAMIN)-DITIOCARBAMATO

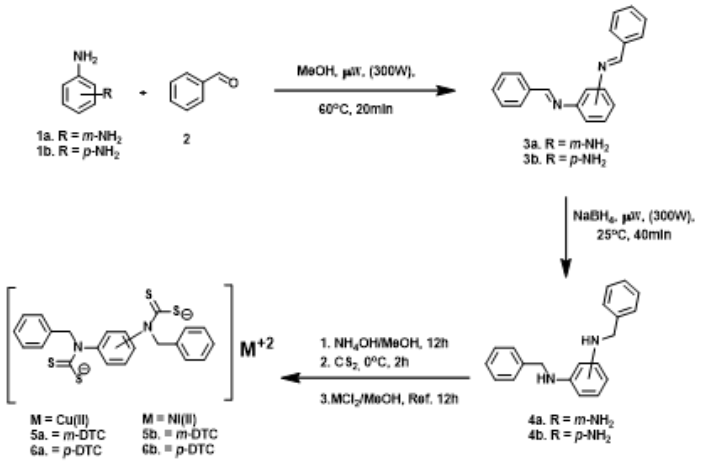
Síntesis y Caracterización de Compuestos de Coordinación de Cu y Sn Derivados de los Isómeros *meta* y *para* de (N,N-dibencilbencenodiamin)-ditiocarbamato

Maria C. Mosquera Olano[1], Nalley A. Becerra Aguirre[1], Jina B. Bastidas Montaño[1], Yenny P. Ávila Torres,[2] Edwin Flórez López [1*]

[1]Grupo de Investigación de Química y Biotecnología (QUIBIO). Facultad de Ciencias Básicas. Universidad Santiago de Cali. Campus Pampalinda Calle 5 # 62-00. Santiago de Cali. Colombia.
[2]Grupo de Remediación Ambiental y Fotocatálisis. Instituto de Química, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia, Medellín. Colombia
**Autor de correspondencia: Edwin.florez00@usc.edu.co*

Palabras Claves: Compuesto de coordinación, carbamato, ligando, síntesis.

En el presente trabajo de investigación se llevó a cabo la síntesis de cuatro compuestos de coordinación (**5a**), (**5b**), (**6a**) y (**6b**) (Esquema 1), cuyos ligandos se sintetizaron a partir de la *m*-fenildiamina y *p*-fenildiamina con benzaldehído, dando lugar a las aminas secundarias N,N-dibencilbenceno-1,3-diamina (**4a**) y N,N-dibencilbenceno-1,4-diamina (**4b**) respectivamente. La formación de las aminas se verificó a través de espectroscopía infrarroja, espectrometría de masas y espectroscopía de RMN de ^{1}H y ^{13}C. Una vez caracterizadas las aminas, se realizó la síntesis in-situ de los compuestos de coordinación formando los ligando (N,N-dibencilbenceno-1,3-diamin)-bisditiocarbamato y (N,N-dibencilbenceno-1,4-diamin)-bisditiocarbamato y coordinándolos con los metales Cu(II) y Ni(II). Los cuatro complejos metálicos se caracterizaron por espectroscopía infrarroja, la cual mostró las bandas particulares de los ditiocarbamatos formados y las bandas de los enlaces azufre-metal características de estos compuestos. Los complejos se analizaron por absorción atómica con el fin de verificar el porcentaje de metal presente en los productos obtenidos y de esta manera sugerir las fórmulas moleculares respectivas. Finalmente, en espectroscopía ultravioleta-visible se evidenciaron las transiciones ligando-metal e intrametal de los orbitales *d* lo que permite sugerir geometrías adecuadas para los productos (**5a**), (**5b**), (**6a**) y (**6b**).



Esquema 1. Ruta sintética parala obtención de los compuestos de coordinación

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

II-140-P ***SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y ANÁLISIS ESTRUCTURAL DE DOS COMPLEJOS DE COORDINACIÓN DERIVADOS DE BIGUANIDA***

Síntesis, Caracterización y Análisis Estructural de Dos Complejos de Coordinación Derivados de Biguanida

Gianella Minotta [a*], **Andrea Pastrana** [a], **Javier Ellena**,[b] **Pedro H. O. Santiago**,[b] **Richard F. D'Vries** [a]

[a] *Grupo de investigación en química y biotecnología (QUIBIO), Universidad Santiago de Cali, Colombia.*
[b] *São Carlos Institute of Physics, University of São Paulo, CEP 13.566-590, São Carlos, SP, Brazil.*
* *Gianella.minotta00@usc.edu.co*

Palabras Claves: Metalofármacos; Metformina; compuestos de coordinación; metales de transición.

En la actualidad existen más de 100 millones de personas en el mundo con diabetes tipo 2,[1] siendo una de las enfermedades crónicas más comunes, que se incluye como una consecuencia del sobrepeso.[2] Por tal motivo, el desarrollo de tratamientos con alternativas farmacológicas toma gran relevancia. En este proyecto se analiza la viabilidad de sintetizar una alternativa para el tratamiento del sobrepeso, teniendo como base la metformina, un tipo de fármaco antidiabético de primera línea perteneciente a la familia de las biguanidas con metales de transición, formando complejos de coordinación ya que se ha encontrado que dichos compuestos pueden ayudar a potencializar el efecto terapéutico.[3,4] Es por esto que se llevó a cabo la síntesis de dos complejos de biguanida, utilizando el ligando metformina y los centros metálicos del cobalto y cobre para formar complejos con fórmula $[Co(Met)_3][CoCl_4]Cl{\cdot}3H_2O$ y $[(Cu(Met)Cl)_2\text{-}\mu\text{-}Cl_2]$ respectivamente. Una vez obtenido los complejos se caracterizaron mediante diferentes técnicas incluyendo difracción de rayos X de monocristal, espectroscopia FT-IR y UV-Vis y análisis térmico. La síntesis y caracterización permitió obtener las estructuras de los compuestos medidos, tal como se evidencia en la **Figura 1**, en donde el primer complejo se caracteriza por ser una sal compleja formada por una subunidad catiónica de Co(III) y una aniónica de Co(II) tetraédrica. El segundo complejo es un compuesto dimérico con dos aniones de cloruro que actúan como puente formando unidades piramidales cuadradas de borde compartido.[5] Para concluir, fue posible establecer una metodología sintética adecuada para la síntesis y obtención de los compuestos de coordinación obteniendo dos compuestos caracterizados completamente.

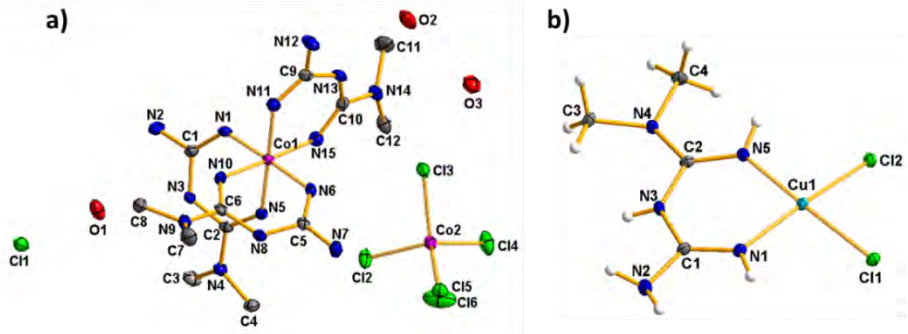


Figura 1. Diagrama tipo ORTEP de la unidad asimétrica de los compuestos a) $[Co(Met)_3][CoCl_4]Cl{\cdot}3H_2O$ y b) $[(Cu(Met)Cl)_2\text{-}\mu\text{-}Cl_2]$.[5]

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

REFERENCIAS

[1]. 1 J. Dostou and J. Gerich, Exp. Clin. Endocrinol. Diabetes, 2001,109, S149–S156.

[2] W. Kerner and J. Bruckel, ¨ Exp. Clin. Endocrinol. Diabetes, 2014, 122, 384–386.

[3]. Al-Saif, F. A., & Refat, M. S. Synthesis, spectroscopic, and thermal investigation of transition and non-transition complexes of metformin as potential insulin-mimetic agents. Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 2012, 111(3), 2079–2096. doi:10.1007/s10973-012-2459-3

[4]. Villamizar-Delgado, S., Porras-Osorio, L. M., Piñeros, O., Ellena, J., Balcazar, N., Varela-Miranda, R. E., & D'Vries, R. F. Biguanide–transition metals complexes as potential drug for hyperglycemia treatment. RSC Advances, 2020, 10(38), 22856–22863. doi:10.1039/d0ra04059b

[5]. Pastrana-Dávila, A. Minotta, G. Ellena, J. Pedro H. O. D'Vries, R. F. Synthesis, Characterization and Structural Analysis of Two New Biguanide Complexes. Crystals, 2023, publicación en progreso.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

II-141-P ***SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y ANÁLISIS ESTRUCTURAL DE COMPLEJOS DE METFORMINA: SIMULACIÓN DE ACOPLAMIENTO Y DINÁMICA MOLECULAR PARA POTENCIAL USO COMO AGENTES ANTIDIABÉTICOS.***

Síntesis, Caracterización y Análisis Estructural de Complejos de Metformina: Simulación de Acoplamiento y Dinámica Molecular para Potencial Uso como Agentes Antidiabéticos.

Andrea Pastrana Dávila[a], Gianella Minotta Aguirre[a], Javier Ellena[b], Jose Oñate Garzón[a], Yamil Liscano[a], Richard F. DVries[a]*

[a] Facultad de Ciencias Básicas, Universidad Santiago de Cali, Colombia
[b] Instituto de Física de São Carlos, Universidad de São Paulo, Brasil
** Autor de correspondencia: richard.dvries00@usc.edu.co*

Palabras Claves: Obesidad; complejos de coordinación; dinámica molecular; metalofármacos;

La metformina es un medicamento dentro del grupo de las biguanidas, la cual es usada para tratar la diabetes tipo 2 (donde hay un alto nivel de azúcar (glucosa) en la sangre). La función que cumple este medicamento dentro del cuerpo es disminuir la cantidad de glucosa que absorbe de los alimentos y la cantidad de glucosa que forma el hígado. Con el interés de mejorar y reducir los efectos secundarios que se producen por la ingesta de este medicamento, se llevó a cabo la síntesis y obtención de complejos de coordinación teniendo como principio activo la metformina y dos metales de transición como lo son el Cu (II) y el Co (II). Habiendo obtenido estos nuevos compuestos, se caracterizaron mediante diferentes técnicas como difracción de rayos X de monocristal, espectroscopia infrarroja (IR) y análisis térmico TGA, permitiendo determinar la estructura exacta. Se lleva a cabo un estudio computacional de dichos compuestos, además de los sintetizados previamente en el grupo de investigación con el mismo principio activo, con centros metálicos de Cu (II), Ni (II), Co (II) y Zn (II). Inicialmente, se hace uso de plataformas en línea que permiten obtener información acerca de las propiedades moleculares de los compuestos, la posible solubilidad como fármaco oral y la capacidad para penetrar la membrana celular. Además, mediante una búsqueda bibliográfica, combinada con las bases de datos de proteínas (PDB) fue posible identificar que el mecanismo de acción de la metformina se da mediante la AMP ("*Proteína Quinasa Activada*") ya que el efecto de la metformina es hipoglucemiante, que ocurre por inhibición de la gluconeogénesis hepática, opuesto a la acción del glucagón. Partiendo de esta información y teniendo en cuenta los datos de las estructuras de los compuestos sintetizados, se lleva a cabo la simulación y modelamiento molecular que permitió determinar el tipo de interacciones que presentan dichos compuestos con los residuos de los aminoácidos de la proteína. Luego de estos resultados, se determinó que solo dos de estos nuevos compuestos podrían funcionar como posible fármaco para uso en el tratamiento de sobrepeso.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

II-142-P ***SÍNTESIS SOLVOTERMAL, CARACTERIZACIÓN Y ESTUDIO ESTRUCTURAL DE 3 MOFS BASADOS EN EL ÁCIDO TRIMÉSICO Y NI2+.***

Síntesis Solvotermal, Caracterización y Estudio Estructural de 3 MOFs Basados en el Ácido Trimésico y Ni^{2+}

Cristian C. Granados [a*], **Mario A. Macías** [a]

[a] *Grupo de investigación en Cristalografía y Química de Materiales (CristQuimMat), Universidad de Los Andes, Colombia*
** Autor de correspondencia: cc.granados@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: redes metal-orgánicas; ácido trimésico; níquel (II) síntesis solvotermal; difracción de rayos x; estructura supramolecular

La síntesis de redes metal-orgánicas (MOFs) y el estudio de sus propiedades han adquirido un alto interés en las últimas décadas debido a que esta clase de compuestos presentan grandes áreas superficiales internas, porosidad, versatilidad estructural, sitios insaturados de coordinación, facilidad de ser modificados estructuralmente, interacciones anfitrión-huésped, entre otras. Estas características hacen que los MOFs sean una clase de compuestos altamente estudiados en las áreas de captura y almacenamiento de gases, catálisis, energías y desarrollo de sensores. Los MOFs basados en níquel (II) y el ácido benceno-1,3,5-tricarboxílico (BTC) son de interés principalmente por su accesibilidad, facilidad de preparación, estabilidad térmica y química, y presencia de sitios de coordinación insaturados. No obstante, el estudio de cómo los diferentes parámetros de la síntesis afectan los productos obtenidos aún genera ciertas dudas y se hace necesario continuar su exploración de forma sistemática. Por lo tanto, en el presente trabajo se llevó a cabo la síntesis de 3 MOFs empleando Ni^{2+} y BTC bajo una metodología solvotermal, su caracterización estructural y el estudio sistemático de cómo los diferentes parámetros de síntesis afectan los productos obtenidos. Como resultados, se determinó que el parámetro de síntesis que mayor influencia tiene sobre los productos es el sistema de solventes empleado y la proporción de cada solvente. De esta forma, al usar diferentes sistemas de solventes, manteniendo las demás condiciones de síntesis constantes y empleando los mismos precursores se obtuvieron 3 compuestos distintos y uno de ellos representa una estructura no reportada previamente en la literatura. Adicionalmente, la caracterización de los compuestos obtenidos por medio de TGA, DSC, FTIR, y difracción de rayos x de polvo y monocristal permitió determinar la obtención de productos puros y con una buena estabilidad térmica. Finalmente, el análisis de la estructura supramolecular de los compuestos permitió: 1) establecer la relación estructural entre los compuestos; 2) determinar la razón por la cual se obtuvieron 2 redes tridimensionales y una red bidimensional y 3) estimar el espacio disponible dentro de los canales de los MOFs.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

II-413-P SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE COMPLEJOS DE DIBROMO-DIOXO-MOLIBDENO(VI) CON LIGANDOS BIDENTADOS 2,2'-BIPIRIDINA Y 1,10-FENANTROLINA

Síntesis y Caracterización de Complejos de Dibromo-dioxo-molibdeno(VI) con Ligandos Bidentados 2,2'-Bipiridina Y 1,10-Fenantrolina

Julián F. Torrado[a]*, Jose G. Carriazo [a], Nelson J. Castellanos[a]

[a] *Laboratorio de Diseño y Reactividad de Estructuras Sólidas (Lab-DRES, 125), Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia*

* Autor de Correspondencia: jtorrado@unal.edu.co

Palabras clave: Complejos de dibromodioxomolibdeno(VI), Transferencia de átomos de oxígeno (TAO), Difracción de Rayos X.

La unidad oxo-metal ha resultado de gran interés por estar presente en una gran variedad de enzimas, conocidas como oxotransferasas que participan en diversas reacciones de oxidación selectiva en la naturaleza *(1,2)*. Una variedad de este tipo de enzimas son conocidas como molibdenoenzimas, las cuales poseen como centro activo una átomo de molibdeno o tungsteno generalmente en el estado reducido +4 o en el estado oxidado +6 *(3)*. Estos sistemas naturales y su funcionamiento son la fuente de inspiración para el desarrollo de compuestos biomimeticos que emulen el comportamiento natural y que puedan trabajar bajo condiciones ambientales de presión y temperatura en reacciones de oxidación selectiva de moléculas de interés. En este sentido, se han estudiado y reportado diferentes tipos de ligandos en su esfera de coordinación, observándose que las mejores actividades se logran al utilizar ligandos nitrogenados que puedan aportar carga al centro metálico a partir de una alta densidad electrónica en su estructura *(4–7)*. En este contexto, en este trabajo se han sintetizado y caracterizado cinco diferentes complejos de la forma $[Mo^{VI}Br_2O_2L]$ a partir de molibdato de sodio, ácido bromhídrico y los ligandos L=4,4'-dimetil-2,2'-bipiridina, 4,4'-*tert*-butil-2,2'-bipiridina, 2,2'-bipiridin-4,4'-dicarboxilato de etilo, 1,10-fenantrolina y 4,7-dimetil-1,10-fenantrolina. Los complejos de coordinación obtenidos se han caracterizado mediante espectroscopía infrarroja, UV-vis, difracción de rayos X en polvo (PXRD), resonancia magnética nuclear de hidrógeno y carbono (^{1}H NMR, ^{13}C NMR) y análisis elemental. La influencia del ligando en la capacidad de transferir átomos de oxígeno ha sido discutida a partir de su caracterización.

Referencias

1. Arzoumanian, H. Molybdenum-oxo chemistry in various aspects of oxygen atom transfer processes. Coordination Chemistry Reviews 1998, 178–180, 191–202.
2. Holm, R. H.; Berg, J. M. Toward functional models of metalloenzyme active sites: analog reaction systems of the molybdenum oxo transferases. Accounts of Chemical Research 1986, 19(11), 363–370.
3. Holm, R. H. The biologically relevant oxygen atom transfer chemistry of molybdenum: from synthetic analogue systems to enzymes. Coordination Chemistry Reviews 1990, 100, 183–221.
4. Arzoumanian, H.; Bakhtchadjian, R.; Atencio, R.; Briceno, A.; Verde, G.; Agrifoglio, G. Characterization of a reduced molybdenum-oxo compound derived from an oxo-transfer process under stoichiometric conditions. Journal of Molecular Catalysis A: Chemical 2006, 260(1–2), 197–201.
5. Arzoumanian, H.; Lopez, R.; Agrifoglio, G. Synthesis and X-ray Characterization of Tetraphenylphosphonium Tetrathiocyanatodioxomolybdate(VI): A Remarkable Oxo Transfer Agent. Inorganic Chemistry 1994, 33(14), 3177–3179.
6. Eğlence-Bakır, S.; Şahin, M.; Özyürek, M.; Ülküseven, B. Dioxomolybdenum(VI) complexes with 4-benzyloxysalicylidene-N/S-alkyl thiosemicarbazones: Synthesis, structural analysis, antioxidant activity and xanthine oxidase inhibition. Polyhedron 2021, 209, 115467.
7. Vrdoljak, V.; Pisk, J.; Agustin, D.; Novak, P.; Parlov Vuković, J.; Matković-Čalogović, D. Dioxomolybdenum(vi) and dioxotungsten(vi) complexes chelated with the ONO tridentate hydrazone ligand: synthesis, structure and catalytic epoxidation activity. New J. Chem. 2014, 38(12), 6176–6185.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

II-428-P ***SÍNTESIS QUÍMICA Y CARACTERIZACIÓN DE NANOBARRAS DE PLATA CON DIVERSOS AGENTES PROTECTORES Y SUS PROPIEDADES ANTIMICROBIANAS CONTRA BACTERIAS GRAM POSITIVO Y NEGATIVO***

Síntesis Química y Caracterización de Nanobarras de Plata con Diversos Agentes Protectores y sus Propiedades Antimicrobianas contra Bacterias Gram Positivo y Negativo.

Santiago Ardila[a]*, Andreas Reiber[a], Elizabeth Jimenez[b]

[a] *Grupo de investigación en química de interfase inorgánica-orgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Los Andes, Colombia*
[b] *Grupo de investigación en bioquímica aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad de Los Andes, Colombia*
**Autor de correspondencia: sa.ardilaf@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: Nanobarras de plata; agente protector; L-cisteína; 4-aminotiofenol; actividad antimicrobiana

Se sintetizaron suspensiones de nanobarras de plata por un método de molde suave simple. Este mismo método de síntesis se modificó para incluir un cambio en el agente protector de bromuro de hexadeciltrimetilamonio (CTAB) a L-cisteína y 4-aminotiofenol. Las nanobarras preparadas presentaron diferentes morfologías y tamaños según resultados de espectroscopía de absorción UV-Visible y los colores presentados por las dispersiones. Se evaluaron los efectos de la maduración de Ostwald en una de las suspensiones de nanobarras para explicar su formación y su gradiente de morfología y tamaño a temperaturas específicas. Finalmente, se llevaron a cabo pruebas de difusión en disco (Kirby-Bauer) para evaluar la actividad antimicrobiana de las dispersiones de nanobarras de plata. Se encontró que: la cantidad de solución semilla adicionada a la solución de crecimiento en que se sintetizan las nanobarras afecta su morfología y tamaño. El cambio de agente protector se confirmó por medio de espectroscopía de absorción UV-Visible. Los ensayos de propiedad antimicrobiana proporcionaron una alta actividad (24.71%-52.86%) para todas las dispersiones en contraste con un control positivo de gentamicina en concentraciones 4180 veces mayores. La actividad más significativa fue encontrada en la dispersión de barras protegidas con L-cisteína.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

II-438-P ***Síntesis y Potencial Actividad Antimicrobiana de Complejos Asimétricos de Cu(II) Derivados de Ligandos con Grupos Pirazol y Bases de Schiff.***

Síntesis y Potencial Actividad Antimicrobiana de Complejos Asimétricos de Cu(II) Derivados de Ligandos con Grupos Pirazol y Bases de Schiff.

David E. Ezenarro[a*], Daniela Fonseca[a], John J. Hurtado[a]

[a] *Grupo de investigación en Química Inorgánica, Catálisis y Bio-inorgánica, Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad de los Andes, Colombia*
** Autor de correspondencia: de.ezenarro10@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: Cobre(II), Bases de Schiff, 3,5-dimetilpirazol, 7-hidroxicumarina.

Hoy en día uno de los desafíos más importantes de la Química Medicinal es el diseño de compuestos antibacterianos. El incremento de las poblaciones de microorganismos resistentes a múltiples medicamentos constituye un problema de salud pública. Esto último hace necesario el desarrollo de mejores antibióticos que presenten nuevos mecanismos de acción y, por lo tanto, se disminuya la resistencia de las bacterias.[1–3] Es importante resaltar que en la literatura se encuentran ejemplos de complejos metálicos cuyos ligandos son antibióticos de uso clínico, los cuales han presentado mejores propiedades terapéuticas que el antibiótico libre. De esta manera, el uso de compuestos de coordinación es una alternativa para enfrentar la crisis de resistencia antimicrobiana y el poco surgimiento en el mercado de nuevos antibióticos.[4,5] Entre los derivados terapéuticos importantes se encuentran los grupos pirazoles y las bases de schiff derivadas de cumarina. Los pirazoles presentan amplias aplicaciones biológicas tales como antimicrobiana, anticancerígena, analgésica y antinflamatoria, entre otras.[6] Por otro lado, las bases de Schiff derivadas de cumarinas presentan variada actividad biológica, propiedades fisicoquímicas interesantes y sirven como modelos de sitios activos de metaloenzimas.[7]

Por lo anterior, en este trabajo se sintetizaron cuatro ligandos nuevos con sus respectivos complejos de Cu(II) derivados del 3,5-pirazol y cumarinas. Tanto ligandos como complejos fueron obtenidos con altos rendimientos. Los ligandos fueron caracterizados mediante espectroscopía de resonancia magnética nuclear (RMN: ^{1}H, ^{13}C, DEPT-135 y HSQC), FT-IR, espectroscopía Raman y UV-Vis, espectrometría de masas y análisis elemental. Los complejos de Cu(II) también fueron caracterizados mediante diversas técnicas espectroscópicas y analíticas. Por último, con el fin de los ligandos y complejos sean evaluados como potenciales agentes antibacterianos, se realizaron estudios de estabilidad en disolución de estos mediante espectroscopía FT-IR y de UV-Vis.

Referencia:

(1) Ganellin, R. Medicinal Chemistry in IUPAC: Accomplishments During the Last Decade. Chemistry International 2015, 37 (5–6), 17–20. https://doi.org/10.1515/ci-2015-0506.
(2) Lima, L. M. Química Medicinal Moderna: desafios e contribuição brasileira. Quím. Nova 2007, 30, 1456–1468. https://doi.org/10.1590/S0100-40422007000600015.
(3) Haas, K. L.; Franz, K. J. Application of Metal Coordination Chemistry To Explore and Manipulate Cell Biology. Chem. Rev. 2009, 109 (10), 4921–4960. https://doi.org/10.1021/cr900134a.
(4) Nurchi, V. M.; Crisponi, G. Editorial: Applications of Medicinal Bioinorganic Chemistry. Current Medicinal Chemistry 2018, 25 (1), 3.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

(5) Rocha, D. P.; Pinto, G. F.; Ruggiero, R.; Oliveira, C. A. de; Guerra, W.; Fontes, A. P. S.; Tavares, T. T.; Marzano, I. M.; Pereira-Maia, E. C. Coordenação de metais a antibióticos como uma estratégia de combate à resistência bacteriana. Quím. Nova 2011, 34, 111–118. https://doi.org/10.1590/S0100-40422011000100022.
(6) Küçükgüzel, Ş. G.; Şenkardeş, S. Recent Advances in Bioactive Pyrazoles. European Journal of Medicinal Chemistry 2015, 97, 786–815. https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2014.11.059.
(7) Patil, S. A.; Naik, V. H.; Kulkarni, A. D.; Badami, P. S. DNA Cleavage, Antimicrobial, Spectroscopic and Fluorescence Studies of Co(II), Ni(II) and Cu(II) Complexes with SNO Donor Coumarin Schiff Bases. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy 2010, 75 (1), 347–354. https://doi.org/10.1016/j.saa.2009.10.039.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

II-489-P SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE UN QUIMIOSENSOR MULTIPARAMETRICO SELECTIVO PARA METALES PESADOS EN MEDIO ACUOSO.

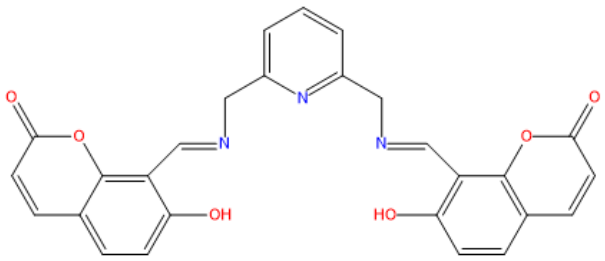
Síntesis y Caracterización de un Quimiosensor Multiparametrico Selectivo Para Metales Pesados en Medio Acuoso.

María H Velosa-Moreno*[a], Marcial A Fuentes-Estrada[b,c], John J Hurtado[a], Olimpo J García-Beltrán[b]

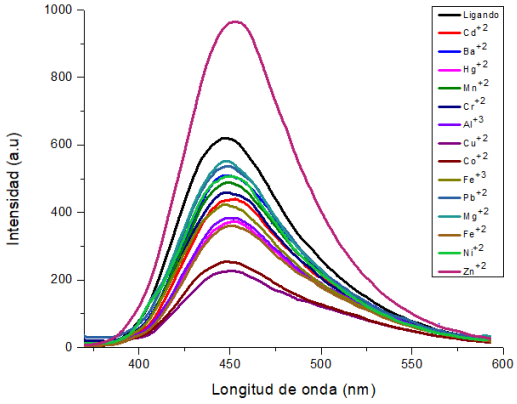
[a]*Departamento de Química, Universidad de los Andes, Colombia*
[b]*Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas, Universidad de Ibagué, Carrera 22 Calle 67, Ibagué 730002, Colombia.*
[c]*Facultad de Ciencias, Universidad del Tolima, Altos de Santa Helena, Ibagué 730006, Colombia.*
** Autor de correspondencia: mh.velosa10@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: quimiosensores, metales pesados, derivados de cumarinas, selectividad, sensibilidad.

Los quimiosensores derivados de imino-cumarinas son sistemas diseñados para identificar y censar iones metálicos de interés médico, biológicos y ambiental, gases, biomoléculas o contaminantes ambientales emergentes. Dichas moléculas se destacan por su alta selectividad y sensibilidad hacia el analito objetivo, manifestándose a través de diversas interacciones no covalentes, como enlaces de hidrógeno, interacciones electrostáticas, enlaces de coordinación, apilamiento π o interacciones hidrofóbicas. Como resultado de estas interacciones, se produce un cambio detectable en las propiedades espectrales y colorimétricas del quimiosensor.. En el presente trabajo se diseñó y sintetizó un quimiosensor derivado de iminocumarinas 8,8'-((1E, 1'E)-((piridin-2,6-diilbis (metileno))bis(azanililideno)(l))bis(metanililideno)) bis(7-hidroxi-2H-cromen-2-ona) (L)



(Figura 1.) el cual fue caracterizado por: análisis Termogravimétrico (TGA), Resonancia magnética nuclear ^{1}H y ^{13}C, Espectroscopía FT-IR y RAMAN, Espectroscopía UV-VIS y Fluorescencia. Este sensor al ser evaluado con diversos iones Cd^{+2}, Ba^{+2}, Hg^{+2}, Mn^{+2}, Cr^{+2}, Al^{+3}, Cu^{+2}, Co^{+2}, Fe^{+3}, Fe^{+2}, Pb^{+2}, Mg^{+2}, Ni^{+2} y Zn^{+2}



(Figura 2.) presentó selectividad y sensibilidad tanto "turn on" al reaccionar en presencia de iones Zn^{+2} y "turn-off" frente a iones Cu^{+2} y Co^{+2} en medio acuoso.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

II-493-P ***SÍNTESIS DE COMPLEJOS DE RUTENIO(II) CON LIGANTES NHPIRAZÓLICOS: REACCIONES DE ALQUILACIÓN EN FASE HOMOGÉNEA DE METILCETONAS***

Síntesis de complejos de Rutenio(II) con ligantes NHpirazólicos: Reacciones de alquilación en fase homogénea de metilcetonas

Fernando Cuenú Cabezas

Laboratorio de Química Inorgánica y catálisis, Programa de Química, Universidad del Quindío.
fercuenu@uniquindio.edu.co

Palabras Claves: Rutenio(II), Alquilación, NHpirazoliminas, DRX

Se presentan los resultados de la síntesis y caracterización de complejos de rutenio(II) del tipo [$RuCl_2$(*p*-cimeno)(NHpz)], donde NHpz son iminoNHpirazoles, compuestos orgánicos considerados versatiles puesto que poseen propiedades antifúngicas, antimaláricas, anticancerígenas entre otras, además por poseer nitrógenos dadores de densidad electrónica se coordinan fácilmente a metales de transición.

Los derivados NHpirazólicos de iminas y sus complejos de rutenio se caracterizaron por diferentes técnicas espectroscópicas tales como IR, RMN, UV-vis, análisis elemental, espectrometría de masas y difracción de rayos X.

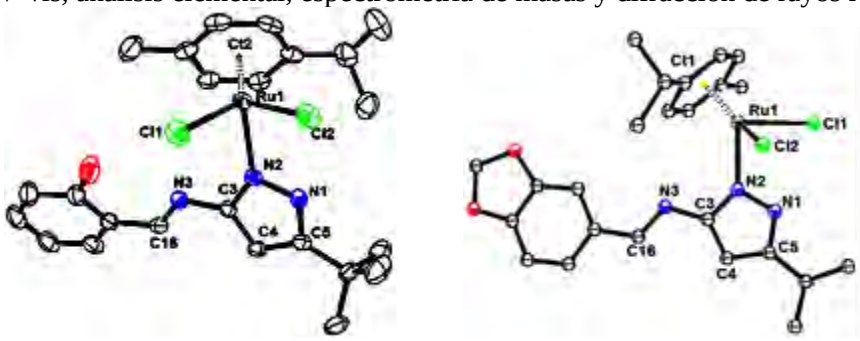


Figura 1. Diagrama ORTEP de los complejos *[Ru(p-cimeno)$(Cl)_2$(NHPz)]*

Los estudios de las reacciones de alquilación de las metilcetonas (acetofenona, 4-metilacetofenona, 4-metoxiacetofenona y 4-nitroacetofenona) y alcohol bencílico, con los complejos aquí sisntetizados, mostraron una alta actividad y selectividad, y el seguimiento de la reacción indica que inicialmente se forma la chalcona y posteriormente se produce su hidrogenación a través de una reacción de transferencia de hidrógeno.

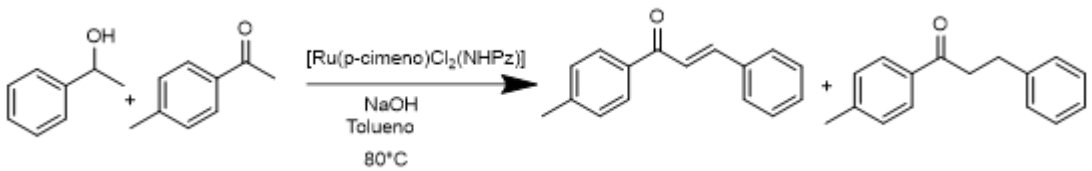


Figura 2. Reacción de alquilación con los complejos *[Ru(p-cimeno)$(Cl)_2$(NHPz)]*

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

II-513-P ***COMPUESTOS FLUORADOS RH (I) –NHC COMO POSIBLES ANTIBACTERIANOS CONTRA KLEBSIELLA PNEUMONIAE MULTIRESISTENTE Y PRODUCTORAS DE BLEE***

Compuestos fluorados Rh (I) –NHC como posibles antibacterianos contra *Klebsiella pneumoniae* multiresistente y productoras de BLEE

Yesenia Sánchez-Lugo [1] , Luis Ángel Turcio-García [2], Hugo Valdés [3] , Simón Hernández-Ortega [2] , María E. Báez-Flores [1] , José Guadalupe Rendon Mandonado [1] , Yesmi Patricia Ahumada Santos [1], Sylvia P. Díaz-Camacho [1], Ricardo Parra-Unda [1*] , David Morales-Morales [2 *]

1. EscuelaFacultad de Ciencias Químicas y Biológicas, Universidad Autónoma de Sinaloa., Ciudad Universitaria, Culiacán, Sinaloa 80013, México.

2. Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, Ciudad de México, C.P. 04510, México.

3. Institut de Química Computacional i Catàlisi and Departament de Química, Universitat de Girona, Campus Montilivi, 17003 Girona, Catalonia, Spain.

* Autor de correspondencia: ricardoparraund@uas.edu.mx

damor@unam.mx

Palabras clave: fluorados; pneuminiae; rodio; azolio.

En el contexto de la creciente cuestión de las bacterias resistentes a múltiples fármacos y la urgente necesidad de nuevos fármacos, presentamos un estudio centrado en la síntesis y evaluación de una serie de compuestos fluorados contra *Klebsiella pneumonia*e. Sintetizamos 11 fluorados sales de azolio, junto con sus análogos de rodio (I), y los probamos contra cepas de *Klebsiella pneumoniae*. Del total de 24 compuestos analizados, Rh–1, Rh–3, y Rh-11 demostró actividad significativa (CIM = 62,5–250 µg/mL) contra tres aislados clínicos multiresistentes a medicamentos de Klebsiella pneumoniae (U–13685), (H–9871), y (U–13815). Además, los compuestos Rh–1, Rh–4, Rh–6 y Rh–11 exhibieron

actividad antibacteriana (CIM = 3,9–250 µg/mL) contra todas las cepas ATCC analizadas.

Es importante destacar que los compuestos no metálicos mostraron una actividad antibacteriana relativamente débil, subrayando el papel crucial del centro metálico en los efectos antibacterianos observados. Estos resultados son de gran interés para el campo del descubrimiento de fármacos y tienen importantes implicaciones para combatir la propagación de bacterias resistentes a múltiples fármacos.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Aplicación en Catálisis Asimétrica de Complejos Metálicos con Ligandos Base Schiff

Iván F. Chávez-Urías[a], Karla A. López-Gastélum[b], Rocío Sugich-Miranda[b], Felipe Medrano-Valenzuela[b], Enrique F. Velázquez-Contreras[a], Fernando Rocha-Alonzo[b]*

[a] Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, México.
[b] Departamento de Ciencias Químico Biológicas, Universidad de Sonora, México.

* Autor de correspondencia: Fernando.RochaAlonzo@UniSon.Mx

Palabras clave: Química de coordinación; catálisis asimétrica; bases de Schiff; ciclopropanación.

Cuando se aborda el tema de compuestos que interactúan con organismos vivos, como fármacos, fragancias y sabores, es inevitable considerar que los elementos fundamentales de los sistemas biológicos son inherentemente quirales. Esto se aplica a una amplia gama de moléculas, desde los pequeños aminoácidos, nucleótidos y monosacáridos, hasta las macromoléculas más grandes, como proteínas, ácidos nucleicos y azúcares. Un dato relevante es que más de la mitad de los fármacos diseñados por el ser humano son moléculas quirales, aunque la mayoría se utilizan en forma de mezclas racémicas. En contraste, los fármacos quirales de origen natural suelen ser enantioméricamente puros.

Interesados en el desarrollo de complejos metálicos capaces de actuar como catalizadores asimétricos, en nuestro grupo hemos sintetizado una serie de complejos de cobre(II) con ligantes tipo base de Schiff, derivados de aminoácidos. Presentaremos la síntesis y caracterización estructural de un par de ellos; al evaluar su potencial como agentes asimétricos en la síntesis de ciclopropanos quirales, encontramos sin embargo, una alta diasteroselectividad.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

II-522-P ***CARBOCATÁLISIS ASISTIDA POR ULTRASONIDO EN MATERIALES CARBONOSOS MODIFICADOS CON HIERRO Y MANGANESO***

Carbocatálisis asistida por ultrasonido en materiales carbonosos modificados con hierro y manganeso

Carolina Quimbaya [a], Efraím A. Serna Galvis [a,b], Ricardo A. Torres Palma [a]*,

Yenny P. Ávila Torres [a]*

[a] GIRAB, Universidad de Antioquia UdeA, Colombia [b] CATALAD, Universidad de Antioquia UdeA, Colombia

**Autor de correspondencia:* yenny.avila@udea.*edu.co*

Palabras Claves: Aserrín, metales de transición, catálisis.

Materiales carbonosos derivados del aserrín (SW) y del pseudotallo del plátano (PS) fueron preparados y modificados con Mn^{2+} y Fe^{3+} y activados con peróxido de hidrógeno (H_2O_2), persulfato (PDS) y peroximonosulfato (PMS). PS-Fe presentó características principalmente como adsorbente frente a CIP (ciprofloxacina) antibiótico ampliamente usado y recalcitrante a procesos convencionales de degradación. Por el contrario, SW-Mn presentó superioridad catalítica con PMS en comparación con H_2O_2 y PDS. El papel del metal en el ciclo catalítico es importante ya que la desprotonación del PMS, favorece la oxidación de Mn(II) a Mn(IV) y esta especie contribuye de forma a directa a la oxidación de CIP. Este mecanismo fue elucidado usando XPS en los ciclos de reúso, voltametría cíclica, RAMAN y análisis elemental. El rol del PMS fue elucidado por vía húmeda, aportando en el mecanismo oxidativo $^1O_2$ de forma predominante. Por otro lado, con la finalidad de generar mayor número de especies oxidantes radicalarias y no radicalarias que aporten al proceso, se asistió el proceso con ultrasonido a 40 KHz. Esto permitió degradación adicional por HO• identificado vía EPR, incremento de la desagregación y sinergia del proceso carbocatalítico sólo con PMS y ultrasonido. Este trabajo muestra efectos sinérgicos en la degradación de contaminantes recalcitrantes usando degradación sonoquímica y carbocatalítica. Así mismo, constituye una nueva gama de catalizadores a partir de materiales carbonosos con alto potencial de reducción y favorecimiento de especies reactivas de oxígeno en procesos de oxidación avanzada [1,2].

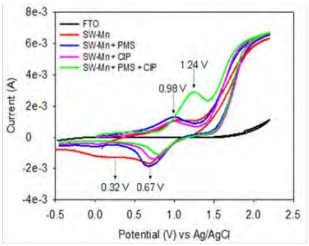


Figura 1. *a). Seguimiento electroquímico del papel del Mn(II) en la degradación de CIP.*

Referencias: [1] [107] S. Liu et al., Appl. Catal. B Environ., vol. 286, no. November 2020, p. 119921,2021, doi: 10.1016/j.apcatb.2021.119921. [2] C. Zhao et al., Chem. Eng. J., vol. 416, no. September 2020, p. 128829, 2021,doi: 10.1016/j.cej.2021.128829.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA MEDICINAL

XV-153-P ***SINTESIS Y ENSAYOS PRELIMINARES DE LA ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA DE UNA BASE DE SCHIFF TIPO TIOSEMICARBAZONA***

Síntesis y Ensayos Preliminares de la Actividad Antibacteriana de una Base de Schiff tipo Tiosemicarbazona

Ana E. Burgos*[a], Edwin Briñez-Ortega[a], Sebastián C. Cháves[a], Camilo J. Viasus[b], Pedro F. Brandão[a]

[a] *Universidad Nacional de Colombia-Sede Bogotá, Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Grupo de Investigación en Química de Coordinación y Bioinorgánica, Avenida carrera 30, N°. 45-03, Bogotá, Código postal 111321, Colombia.*
[b] *Department of Chemistry and Biomolecular Science, University of Ottawa, Canada.*
** Autor de correspondencia: aeburgosc@unal.edu.co*

Palabras Claves: Bases de Schiff; Tiosemicarbazonas; Actividad Antibacteriana; Isómero *E*

Las tiosemicarbazonas (TSC) son conocidos por tener una amplia gama de aplicaciones biológicas, como agentes antivirales, antifúngicos, antibacterianos, antipalúdicos y anticancerígenos [1]. Sin embargo, en la actualidad el uso de fármacos tradicionales es limitado, por la resistencia de los microrganismos a estos. Por tanto, como estrategia se buscan nuevos fármacos derivados de las TSC con mejor actividad y menos efectos tóxicos secundarios [2]. En consecuencia, en este trabajo de investigación se realizó la síntesis, caracterización y evaluación de la actividad antibacteriana de un derivado de TSC.

El isómero *E* derivado de la tiosemicarbazona, con tautomería tiona, en estado sólido y en solución fue obtenido a través de la reacción 4-etiltiosemicarbazida con 2,6-diclorobenzaldehído (Figura 1). Este compuesto fue caracterizado por espectrometría de UV, IR, RMN bidimensional, análisis elemental y su estructura cristalina fue determinada por DRX monocristal. La actividad antimicrobiana del compuesto fue evaluada *in vitro* por el método de difusión en agar, con sensidiscos frente a cepas bacterianas (*S. aureus* y *E. coli*), en una solución de 5 mg/mL de TSC en DMSO y usando ciprofloxacina 3 mg/mL como control positivo. Todas las pruebas se realizaron por duplicado. En comparación con la ciprofloxacina, los halos de inhibición medidos mostraron que TSC tiene actividad antibacteriana frente a *S. aureus* (14 mm) y *E. coli* (8 mm). Se encontró que la concentración mínima inhibitoria (MIC) para TSC fue de 2 mg/mL frente a *S. aureus*.

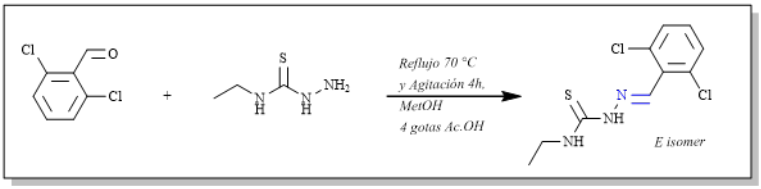


Figura 1. Esquema de reacción para la síntesis de un derivado de tiosemicarbazona.

[1] Mrozek-Wilczkiewicz A, Malarz K, Rejmund M, Polanski J, Musiol R. Anticancer activity of the thiosemicarbazones that are based on di-2-pyridine ketone and quinoline moiety. Eur J Med Chem. 2019; 171:180-194. https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2019.03.027.
[2] Martin J, Alés MR, Asuero AG. An overview on ligands of therapeutically interest. Pharm Pharmacol Int J. 2018; 6:198-214. https://doi.org/10.15406/ppij.2018.06.00177.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XV-154-P ***EFECTIVIDAD DE MOLÉCULAS TIPO ESTIRILQUINOLINAS EN MODELO ANIMAL FRENTE A LA ENFERMEDAD DE CHAGAS: UNA ALTERNATIVA PARA EL DESARROLLO NUEVOS MEDICAMENTOS***

Efectividad de Moléculas tipo Estirilquinolinas en Modelo Animal Frente a la Enfermedad de Chagas: Una Alternativa para el Desarrollo Nuevos Medicamentos.

Fernis J Marin [a]*, **Roger D Espinosa** [a], **Sara M Robledo** [b], **Alex A Sáez** [c], **Camilo A Guzmán** [a]
[a] *Grupo de investigación IDEFARMA, Universidad de Córdoba, Colombia.*
[b] *PECET – Facultad de Medicina, Universidad de Antioquia, Colombia.*
[c] *Grupo de Investigación en Biología y Bioprocesos, Universidad EAFIT, Colombia*
* *Autor de correspondencia: fjosemarin@correo.unicordoba.edu.co*

Palabras Claves: *Trypanosoma cruzi*, Actividad Antiprotozoaria, Estirilquinolinas, Enfermedad de Chagas.

La enfermedad de Chagas (EC) o tripanosomiasis americana es una enfermedad tropical desatendida, causada por la infección del parásito *Tripanosoma cruzi*, endémica en 98 países del mundo y 21 países de América latina, usualmente asintomática, causante de lesiones severas como arritmias cardíacas, megacolon y megaesófago y es potencialmente mortal en su fase crónica. Para su tratamiento se usan como medicamentos de primera línea el Benznidazol y Nifurtimox, con más de 60 años de uso, lo cual ha generado la aparición de resistencia de más del 27% de las diferentes cepas de *T. cruzi*, con marcadas limitaciones como toxicidad sistémica, disminución de efectividad a mayor tiempo de infección, afectos adversos como vómito, náuseas, dolor abdominal, por lo tanto, las estirilquinolinas se proponen como una alternativa para el desarrollo de nuevos prototipos de medicamentos debido a la importante actividad presentada por estas moléculas contra el parásito *T. cruzi*. En este estudio se sintetizaron 10 (1-10) estirilquinolinas mediante la reacción entre la quinaldina y 8-hidroxiquinaldina con diferentes aldehídos aromáticos (Figura 1), con rendimientos desde 36% hasta 78%.

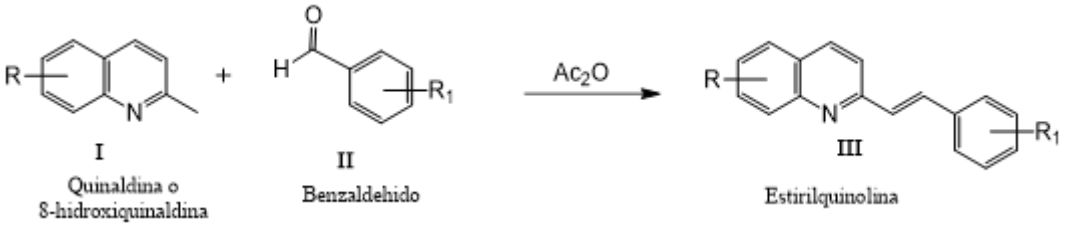


Figura 1. Reacción de síntesis de estirilquinolínas

Las estructuras fueron confirmadas por técnicas espectroscópicas de RMN. Se evaluó la actividad *in vivo* de todos los compuestos contra *T. cruzi* en 60 ratones domésticos (*Mus musculus*) cepa endogámica Balb/c (en grupos de 5), que fueron infectados vía intraperitoneal, cada uno con 100 tripomastigotes sanguíneos de la cepa Tulahuen- Bgal de *T.cruzi*. La infección se confirmó al día 12 posinoculo, los ratones tratados con los compuestos y Benznidazol (BNZ) no mostraron signos clínicos de gravedad con la administración de los tratamientos, todos los compuestos evaluados fueron capaces de reducir la cantidad de parásitos en sangre luego de tres meses postratamiento (PTD90) mostrando porcentajes de reducción con valores entre 9.3% y 91.5%, siendo los compuestos 8 y 10 los responsables de la mayor inhibición de infección con un %Inh de 87.8% y 91.5%,respectivamente, estos resultados, proponen las estirilquinolinas como una fuente de compuestos potencialmente activos contra el parásito *T. cruzi*, con miras al desarrollo de nuevas alternativas terapéuticas para el tratamiento de la enfermedad de Chagas.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XV-155-P ***PERFIL NEUROFARMACOLÓGICO DE NUEVOS COMPUESTOS TIAZEPÍNICOS Y TIAZOLIDÍNICOS SELECCIONADOS MEDIANTE CRIBADO VIRTUAL***

Perfil Neurofarmacológico de Nuevos Compuestos Tiazepínicos y Tiazolidínicos Seleccionados Mediante Cribado Virtual

Juan S. Carrero [a], Estéfany Arias [a], Paola A. Cuervo [b], Fabián Orozco [b], Christian Becerra [b] Mario F. Guerrero [a]*

[a] *Dpto. Farmacia, Universidad Nacional de Colombia, Colombia*
[b] *Dpto. Química, Universidad Nacional de Colombia, Colombia*
** Autor de correspondencia: mfguerrerop@unal.edu.co*

Palabras Claves: Antidepresivo, diseño de fármacos, cribado virtual, espirotiazolidina, receptor $GABA_A$/BZD

En esta investigación se evaluó el perfil farmacológico sobre sistema nervioso central de los compuestos tiazepinicos y tiazolidinicos cpTP-0, cpTP-1, TAP-2 y cpTAP-2 (Figura 1), seleccionados a partir de cribado virtual frente al sitio de unión a benzodiazepinas de un receptor $GABA_A$, en modelos murinos de ansiedad, depresión, hipnosis-sedación y convulsión. Adicionalmente, se evaluó la posible neurotoxicidad aguda de los compuestos mediante el test de Irwin y el ensayo del eje rodante. En primera medida, los compuestos se evaluaron a dosis de 100 mg/kg en los modelos de laberinto en cruz, nado forzado, suspensión por la cola, potenciación de sueño barbitúrico e inducción de convulsiones con pentilentetrazol, empleando ratones CD-1 machos y hembras (n=4/sexo), donde se detectó posible actividad antidepresiva del compuesto cpTAP-2 en el modelo de nado forzado en ratones macho. En una segunda fase se efectuaron experimentos dosis-respuesta de cpTAP-2 en los modelos de campo abierto, eje rodante, nado forzado y suspensión por la cola en ratones machos y hembras a dosis de 30, 60, 100 y 300 mg/kg (n=5/sexo); en los cuales se confirmó la actividad de cpTAP-2 a dosis de 100 y 300 mg/kg en la prueba de nado forzado, así como la ausencia de alteración de la actividad locomotora de los animales o impedimento en su capacidad de mantener el equilibrio sobre el eje rodante. Por último, se evaluó la actividad de ratones macho tratados con cpTAP-2 a dosis de 100 y 300 mg/kg en presencia del antagonista del receptor $GABA_A$ flumazenil, revirtiéndose el efecto. Los resultados de este estudio sugieren que el compuesto cpTAP-2 (4[4-(4-etoxifenil)-6-fenilpirimidin-2-il]-1-tia-4-azaespiro[4.4]nonan-3-ona) ejerce efectos de tipo antidepresivo posiblemente vinculados con la interacción sobre el receptor $GABA_A$.

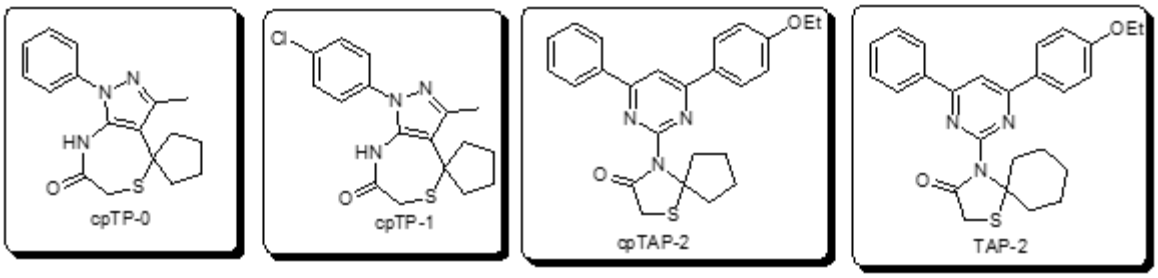


Figura 1. Estructura de los compuestos evaluados.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Evaluación de la Actividad Citotóxica *in vitro* de Análogos Quinolínicos Sintéticos

Roger D Espinos[a*], Sara M Robledo[b], Camilo A Guzman[a], Fernis J Marin[a], Alex A Sáez[c]

[a] *Grupo Investigación IDEFARMA, Universidad de Córdoba, Colombia.*
[b] *Programa de Estudio y Control de Enfermedades Tropicales - PECET, Universidad de Antioquia, Colombia*
[c] *Escuela de Ciencias Aplicadas e Ingenierías, Universidad EAFIT, Medellín, Colombia*
** Autor de correspondencia: rdespinosasaez@correo.unicordoba.edu.co*

Palabras Claves: Análogos Quinolínicos; actividad antitumoral; síntesis orgánica; citotoxicidad, cáncer gástrico, cáncer colorrectal.

El cáncer es una de las enfermedades más peligrosas que existen, esta enfermedad ha sido una de las principales causas de muerte en todo el mundo en las últimas décadas. Se espera que la incidencia de cáncer aumente en 28,9 millones de nuevos casos en todo el mundo para el año 2040, se estima que, las muertes por esta enfermedad sigan aumentando, alcanzado una cifra de 24 millones en 2035, de mantenerse esta tendencia será considerada la primera causa de muerte en este siglo. La limitada eficacia de los fármacos utilizados en pacientes con metástasis debido a la baja selectividad hacia las células cancerosas, alta toxicidad sistémica y graves efectos adversos, dificultan un buen tratamiento. Estudios actuales reportan la efectividad sobre diferentes líneas celulares de cáncer como; mama, colon, pulmón, colorrectal, renal, entre otros de una diversidad de compuestos que presentan una variedad de núcleos moleculares, dentro de los que se resaltan los heterociclos quinolínicos y sus derivados, por lo tanto, este estudio tuvo como propósito la identificación de compuestos antitumorales a partir de análogos quinolínico sintéticos. Para la síntesis se empleó una reacción entre Quinaldina y 8- hidroxiquinaldina con diferentes aldehídos aromáticos (oxigenados, halogenados y nitrados) usando anhidridos acético y calor como medio de reacción. Para la identificación estructural de los compuestos se empleó técnicas espectroscópicas de RMN en 1D y 2D e Infrarrojo (IR), para realizar el ensayo de citotoxicidad se empleó la línea celular SW48 (ATCC® CRL-237™), la cual proviene de un nicho Pre-metastásico de cáncer colorrectal, el efecto de los compuestos en la viabilidad de las células se determinó por el micrométodo colorimétrico enzimático MTT. Se obtuvieron diecisiete (17) compuestos 2-Estirilquinolinas, rotulados del **Q1** al **Q17** con rendimiento que van de 20-40%, se observó que todos los compuestos mostraron ser citotóxicos a la línea celular SW48, de estos, **Q2, Q6, Q8, Q10, Q11, Q12, Q13, y Q14** fueron los más citotóxicos con valores de Concentración letal media (CL_{50}) que van de 0.31 a 38.12 µg/mL en comparación con el medicamento control Doxorubicina (DOX) con un CL_{50} 0.37 µg/mL.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XV-157-P ***SÍNTESIS DE NANOPARTÍCULAS MULTIFUNCIONALES CON POTENCIAL PARA EL TRANSPORTE Y LIBERACIÓN CONTROLADA DE MEDICINAS ANTICANCERÍGENAS***

Síntesis de nanopartículas multifuncionales con potencial para el transporte y liberación controlada de medicinas anticancerígenas

Gabriel E. Castro [a], **Dr. rer. nat. Andreas Reiber** [b]
[a] *QUIMINORG, Universidad de los Andes, Colombia*
[b] *QUIMINORG, Universidad de los Andes, Colombia*
* *Autor de correspondencia: ge.castroc@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: SPIONs, Pilarenos, liberación controlada, crosslinking de carboiimida

En el 2020 más de 100.000 personas en Colombia fueron diagnosticadas y 54.272 murieron por causa del cáncer, el tratamiento de esta enfermedad requiere de diagnóstico adecuado y rápido para encontrar y eliminar tumores metastáticos a tiempo, sea esta eliminación producto de agentes farmacológicos o por la destrucción física del tumor mismo. Existen sistemas que cumplen con funciones diagnósticas y terapéuticas al mismo tiempo, ayudando a encontrar estos tumores más rápidamente y destruirlos tanto por la liberación de medicamentos como por la ablación térmica del tejido tumoral al inducir hipertermia en estos sistemas; sin embargo, muchos de éstos carecen de especificidad a la hora de liberar el medicamento en el lugar necesario o sufren de tiempos de liberación extremadamente largos, haciendo que el prospecto de su uso terapéutico sea difícil.

Teniendo esto en cuenta se decidió sintetizar nanopartículas superparamagnéticas de óxido de hierro funcionalizadas con pilarenos para estudiar su capacidad de absorber fluoresceína y liberarla en condiciones de pH y temperatura específicas. Se encontró que las nanopartículas funcionalizadas con pilarenos tienen un porcentaje de carga aproximado del 60% con la fluoresceína, también se encontró que las nanopartículas que se calentaron a 45°C y se mantuvieron a pH=7.4 liberaron 5% de su carga 4 horas antes de lo que la liberaron las mismas nanopartículas a 22°C y el mismo pH. También se encontró también que las nanopartículas que se calentaron a 45°C y se mantuvieron a pH=4.8 liberaron aproximadamente del doble de fluoresceína en 52 horas que las mismas nanopartículas a 22°C y el mismo pH, evidenciándose así un aumento en la velocidad de liberación por el aumento de la temperatura.

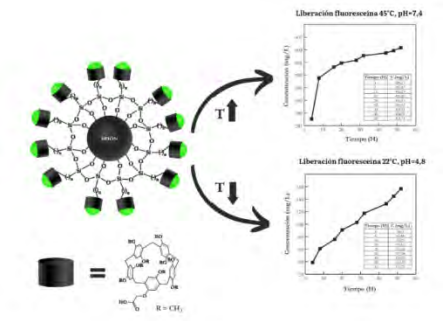


Figura 1: Curvas de liberación acumulada de fluoresceína a pH=4,8

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XV-383-P ***FRACCIONES DERIVADAS DE SCUTELLARIA INCARNATA DISMINUYEN LA VIABILIDAD CELULAR DE LAS LÍNEAS CELULARES TUMORALES K563 Y U937.***

Fracciones derivadas de *Scutellaria incarnata* disminuyen la viabilidad celular de las líneas celulares tumorales K563 y U937.

Xandy M. Rodríguez [a], **Liliana A. Naranjo-Amaya** [a], **Camilo Mahecha-Mahecha** [a], **Luis M. Pombo** [a], **Paola Borrego-Muñoz** [a]*.

[a] *Grupo de Investigación en Farmacología Vegetal y Terapéuticas Alternativas - GIFVTA, Escuela de Medicina, Fundación Universitaria Juan N. Corpas, Bogotá, Colombia.*

* *Autor de correspondencia: paola.borrego@juanncorpas.edu.co*

Palabras Claves: Citotoxicidad, *Scutellaria incarnata*, Linfoma, Leucemia.

El cáncer se ha constituído como un desafío importante para la salud pública debido a su incidencia en aumento y la alta tasa de mortalidad. En población de niños y adolescentes los tipos más comunes son la leucemia linfoblástica aguda, el linfoma de Burkitt y el de Hodgkin, que abarcan el 60% de todos los cánceres infantiles. En los países más pobres de América Latina y el Caribe, la supervivencia de estos pacientes es de alrededor del 20% debido a diagnósticos tardíos y falta de acceso a tratamientos oportunos, por lo cual, se hace necesario plantear nuevas alternativas de tratamiento frente a estos tipos de cáncer, basados en productos naturales.

La investigación de especies vegetales endémicas representa una fuente promisoria de nuevos agentes anticancerígenos entre las que se encuentra *Scutellaria incarnata* Vent. conocida comúnmente como "alegría" o "contentica, es una planta nativa de Colombia. Hasta la fecha solo se han reportado compuestos fenólicos (tipo flavonoide) y la acción citotóxica de sus extractos y fracciones no ha sido explorada. Con esta investigación se busca evaluar la actividad citotóxica sobre las líneas celulares tumorales K563 (Leucemia mielode–eritroleucemia) y U937 (línea celular tipo linfoma-monocítico) de extractos y fracciones de *S. incarnata.*

A partir de las partes aéreas secas y molidas, se realizó la obtención del extracto etanólico por medio de un equipo tipo Soxhlet. A partir del extracto se obtuvieron fracciones en orden creciente de polaridad (hexano-etanol). La evaluación de la actividad citotóxica se realizó por el método del MTT en un rango de concentraciones de 1,6 a 200 µg/mL y el cálculo del valor de IC_{50} se realizó por medio de una regresión no lineal.

Las fracciones que mostraron menores valores de IC_{50} fueron: acetato de etilo (5.32 µg/mL), hexano (10.63 µg/mL), diclorometano (12.47 µg/mL) y el extracto etanólico (21.61 µg/mL) sobre la línea K563. Posteriormente, se continuará con el estudio sobre la línea U937. La determinación de la composición química de las fracciones con mayor actividad citotóxica se realizará por medio de técnicas cromatográficas y espectroscópicas.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

XV-392-P ***ANÁLISIS DE RELACIÓN ESTRUCTURA-ACTIVIDAD ASISTIDA POR ISÓMEROS POSICIONALES DE FENILFENALENONA (PISPA-SAR) COMO HERRAMIENTA PARA LA IDENTIFICACIÓN DE COMPUESTOS "HIT" EN QUÍMICA MEDICINAL.***

Análisis de Relación Estructura-Actividad Asistida por Isómeros Posicionales de Fenilfenalenona (PISPA-SAR) como Herramienta para la identificación de compuestos "HIT" en Química Medicinal.

Ana Prieto[a], William Hidalgo[b], Felipe Otálvaro[a]*

[a] *Síntesis y Biosíntesis de Metabolitos Naturales, Universidad de Antioquia, Colombia*
[b] *Grupo de Investigación en Bioquímica y Microbiología, Universidad Industrial de Santander, Colombia*
* *Autor de correspondencia: leon.otalvaro@udea.edu.co*

Palabras Claves: Fenilfenalenonas, isómeros posicionales, *Mycosphaerella fijiensis*

La química medicinal, quizás el campo de acción más popular para los químicos orgánicos, parece estar plagada de un diseño pobre de análogos estructurales (principalmente impulsados por la conveniencia sintética) que se traduce en un análisis improductivo de la relación estructura-actividad (SAR). Esta situación, combinada con los pequeños presupuestos de investigación actuales, exige la implementación de estrategias más inteligentes para el diseño de análogos. El análisis sistemático SAR por medio de isómeros posicionales representa una posibilidad interesante al facilitar la inferencia de tendencias que de otra forma serían de difícil deducción. En este trabajo se sintetizó una serie congenérica de isómeros posicionales de fenilfenalenona la cual fue evaluada contra el hongo *M. fijiensis* (sigatoka negra del banano). Esto facilitó la creación de una hipótesis farmacofórica para la selección racional de candidatos HIT (Figura 1). La síntesis y evaluación preliminar de algunos compuestos producto de la extrapolación es presentada.

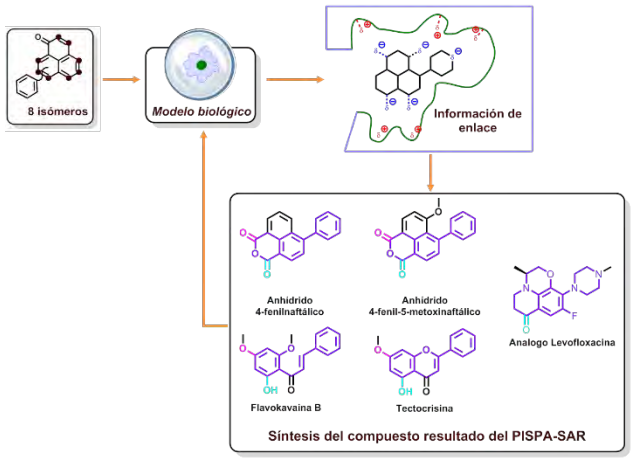


Figura 1: Representación del análisis de isómeros posicionales de fenilfenalenona (PISPA-SAR) para la generación de hipótesis farmacofóricas.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA ORGÁNICA

I-159-P ***ISOMERIZACIÓN DE 7-ARIL-3-FORMILPIRAZOLO[1,5-A]PIRIMIDINAS A 5-AROIL-NH-PIRAZOLO[3,4-B]PIRIDINAS VÍA APERTURA Y CIERRE DE ANILLO EN MEDIO BÁSICO***

Isomerización de 7-Aril-3-formilpirazolo[1,5-*a*]pirimidinas a 5-Aroil-*NH*-pirazolo[3,4-*b*]piridinas vía Apertura y Cierre de Anillo en Medio Básico

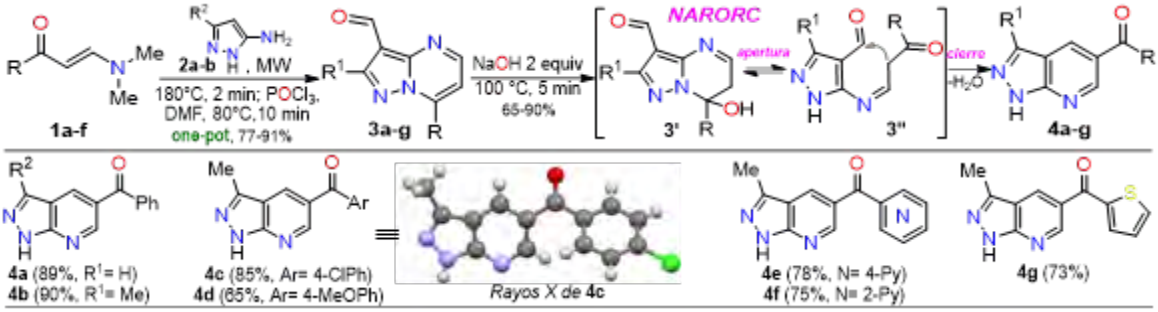
Carlos A. Cifuentes [a,*], **Néstor F. Bravo** [a], **Jaime Portilla** [a]

[a] *Grupo de Investigación en Compuestos Bio-orgánicos (GICOBIORG), Departamento de Química, Universidad de los Andes, Carrera 1 No. 18A-10, Bogotá 111711, Colombia.*

* *Autor de correspondencia: c.cifuentese@uniandes.edu.co*

Palabras Clave: Hidrólisis; isomerización; NARORC; pirazolo[1,5-*a*]pirimidina; pirazolo[3,4-*b*]piridina.

Las pirazolo[3,4-*b*]pirdinas (PPys) son sistemas heteroaromáticos con una fusión 5 (pirazol):6 (piridina), de amplio valor sintético debido a su reconocido uso en química medicinal, industrial, farmacéutica, de materiales, etc.[1] El acceso usual a PPys se da a partir de 5-aminopirazoles *N*-sustituidos y 1,3-*bis*-electrofilos construyendo el anillo piridínico y, en menor medida, formando el anillo pirazólico desde piridinas. Aunque nuestro grupo ha estudiado las PPys,[2,3] se ha centrado más en la química de las pirazolo[1,5-*a*]pirimidinas (PPs)[4,5] encontrando resultados sintéticos y fotofísicos fascinantes; por ejemplo, hace poco se intentó hacer la reacción de Cannizzaro sobre 7-aril-3-formilpirazolo[1,5-*a*]pirimidinas **3** pero se produjo su isomerización a 5-aroil-*NH*-pirazolo[3,4-*b*]piridinas **4** vía un mecanismo de adición nucleofílica, apertura de anillo y cierre de anillo (NARORC, del inglés), Esquema 1. Dado estos resultados inéditos, se estudió a fondo la reacción obteniendo eficientemente los productos bajo microondas, con amplio alcance del sustrato y usando solo 2 equiv de NaOH.



Esquema 1. Isomerización mediada por NaOH de pirazolo[1,5-*a*]pirimidinas **3a-g** a pirazolo[3,4-*b*]piridinas **4a-g**

Como un resultado, se ha logrado desarrollar una metodología novedosa y eco-compatible que permite acceder a compuestos altamente funcionalizados y con un alto potencial de aplicaciones. Por ejemplo, sobre **2** se pueden desarrollar reacciones de *N*-alquilación, *N*-arilación y *N*-acilación sobre el *NH* pirazólico, mientras que sobre el grupo aroilo se darían reacciones de reducción, Knoenevagel, Wittig, etc. Las PPys se caracterizaron via espectroscopia de RMN, espectrometría de masas (HRMS) y por fortuna, por cristalografía de rayos X se pudo establecer las estructuras, lo que se hubiese complicado con las otras técnicas por los resultados tan inéditos.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-160-P ***SÍNTESIS DE NUEVOS QUIMIOSENSORES DE ANIONES BASADOS EN MOLÉCULAS HÍBRIDAS DE CUMARINA–PIRAZOLO[1,5-A]PIRIMIDINA–HEMICIANINA***

Síntesis de Nuevos Quimiosensores de Aniones Basados en Moléculas Híbridas de Cumarina–Pirazolo[1,5-*a*]pirimidina–Hemicianina

Nestor F. Bravo [a,*], **Jaime A. Portilla** [a],

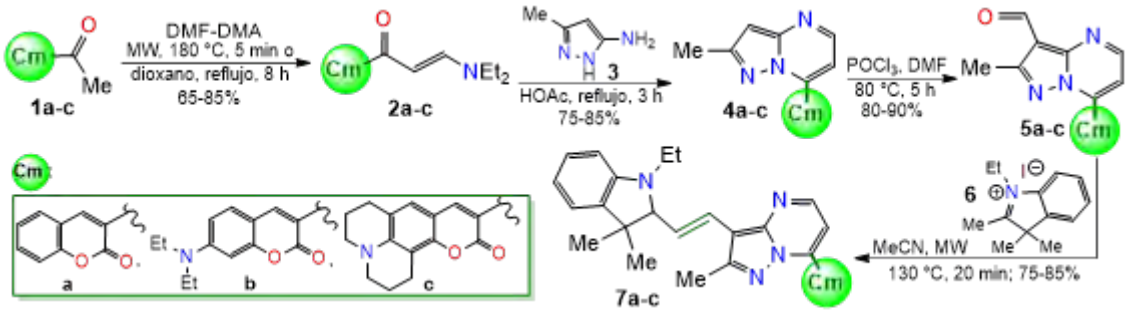
[a] *Grupo de Investigación en Compuestos Bio-orgánicos (GICOBIORG), Departamento de Química, Universidad de los Andes, Carrera 1 No. 18A-10, Bogotá 111711, Colombia.*

* *Autor de correspondencia: nf.bravo@uniandes. edu.co.*

Palabras clave: Cumarina; Pyrazolo[1,5-*a*]pirimidina; Propiedades fotofísicas; Cianuro; Sulfito.

La presencia de iones tóxicos en cuerpos de agua tiene impactos nocivos en la salud de la población mundial y, sobre todo, en personas que habitan cerca a dichos cuerpos. El anión cianuro (CN^-) es una especie enormemente tóxica para los sistemas fisiológicos causando la muerte en un gran porcentaje,[1] mientras que los aniones sulfito (SO_3^{2-}) y bisulfito (HSO_3^-) han demostrado ser nocivos en procesos respiratorios y gástricos.[2] Por ello, es crucial estudiar métodos para la determinación de estos aniones.

Debido a las excepcionales propiedades fotofísicas de los derivados de cumarina (Cm)[3] y de algunas pirazolo[1,5-*a*]pirimidinas (PPs),[4] así como la versatilidad sintética de estos fluoróforos, se favorece su combinación en el diseño de fluoróforos modulables (óptica y sintéticamente) para posteriormente integrarles la unidad de reconocimiento que permita la detección de dichos aniones. Considerando los avances en el GICOBIORG en este campo,[5] se propuso la síntesis de un nuevo fluoróforo híbrido que posee un grupo de hemicianina (sal de indolinio) como unidad de reconocimiento, es decir, el sistema conjugado cumarina–pirazolo[1,5-*a*]pirimidina–hemicianina **6a-c**. Los compuestos **6a-c** se obtienen mediante una secuencia de 4 pasos que inicia desde las respectiva 3-acetilcumarinas **1a-c** y los intermedios (**2**, **4** y **5**) y productos finales (75-85%) se aislaron con altos rendimiento (Esquema 1). Los espectros de absorción de los compuestos mostraron una banda principal en 465 nm que se asignó a un proceso ICT. Las sales **6a-c** se evaluaron frente a la detección de aniones por medios fotofísicos, encontrando que es posible detectar iones cianuro, sulfito y bisulfito.



Esquema 1. Síntesis de los compuestos conjugados cumarina–pirazolo[1,5-*a*]pirimidina–hemicianina **6a-c**.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-162-P ***SÍNTESIS Y EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTITUMORAL DE 3-HIDROXI-2,3-DIHIDROBENZO[B]FURANOS Y BENZO[B]FURANOS}***

Síntesis y evaluación de la actividad antitumoral de 3-hidroxi-2,3-dihidrobenzo[*b*]furanos y benzo[*b*]furanos

Alexander Ladino [a], **Cristian Tocancipá** [a], **Hugo Rojas** [a], **Jaime Portilla** [b], **Diana Becerra** [a,*] **y Juan Castillo** [a,*]

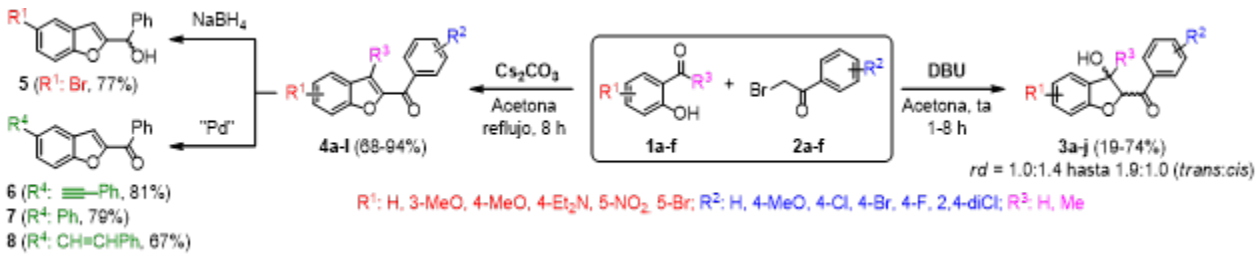
[a] *Grupo de Catálisis de la UPTC, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Colombia.*
[b] *Grupo de Investigación en Compuestos Bio-orgánicos, Universidad de los Andes, Colombia.*

**Autores de correspondencia: diana.becerra@08uptc.edu.co, juan.castillo06@uptc.edu.co*

Palabras Claves: 3-Hidroxi-2,3-dihidrobenzo[*b*]furanos; Benzo[*b*]furanos; Condensación aldólica; Condensación Rap-Stoermer; Actividad antitumoral

El núcleo 3-hidroxi-2,3-dihidrobenzo[*b*]furánico se encuentra en diversos productos naturales, tales como el Silvestrol, el Avicenol A y el Rocaglaol, los cuales han presentado una importante actividad antitumoral [1,2]. Además, este oxa-heterociclo experimenta una deshidratación que conduce al sistema benzo[*b*]furánico, el cual está presente en medicamentos comerciales como la Amiodarona, el Befunolol y el Bergapten [3]. En particular, la síntesis de 3-hidroxi-2,3-dihidrobenzo[*b*]furanos presenta un desafío importante debido a la escasez de metodologías, y además, existe una carencia de datos significativos sobre su actividad antitumoral.

Para tal propósito, se realizó la reacción aldólica intramolecular mediada por 1,8-diazabiciclo[5.4.0]undec-7-eno entre los 2-hidroxibenzoíl derivados **1** y los bromuros de fenacilo **2** en acetona a temperatura ambiente para la obtención de 2-benzoíl-3-hidroxi-2,3-dihidrobenzo[*b*]furanos **3** con rendimientos en el rango de 19–74% y con una diastereoselectividad *trans*:*cis* que varió desde 1.0:1.4 hasta 1.9:1.0, respectivamente (Esquema 1). Posteriormente, se efectuó la reacción de condensación Rap-Stoermer mediada por carbonato de cesio en acetona a reflujo para la obtención de 2-benzoílbenzo[*b*]furanos **4** con rendimientos en el rango de 68–94%. Finalmente, se funcionalizó el benzo[*b*]furano **4f** (R^1 = 5-Br, R^2 = R^3 = H) mediante las siguientes reacciones: (*i*) reducción del grupo carbonilo para obtener **5** (77%), (*ii*) reacción de Sonogashira con fenilacetileno para generar **6** (81%), (*iii*) reacción de Suzuki-Miyaura con ácido fenilborónico para obtener **7** (79%) y (*iv*) reacción de Heck con estireno para producir **8** (67%).



Esquema 1. Síntesis y funcionalización de 3-hidroxi-2,3-dihidrobenzo[*b*]furanos **3a–j** y 2-benzoílbenzo[*b*]furanos **4a–l**.

El National Cancer Institute (NCI, EEUU) evaluó la actividad antitumoral *in vitro* de todos los 3-hidroxi-2,3-dihidrobenzo[*b*]furanos **3a–j** frente a 60 líneas celulares tumorales humanas, utilizando una dosis única de 10 μM. Entre

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

estos compuestos, el **3e (**R^1 = R^3 = H y R^2 = 4-Cl) mostró la mejor inhibición con un %GI del 81.77 frente a la línea celular SNB-75, asociada a tumores en el sistema nervioso central.

[1] R. Cencic, M. Carrier, G. Galicia-Vázquez, et al., *PLoS One* **2009**, *4*, e5223.
[2] L. Pan, U. Muñoz Acuña, J. Li, et al., *J. Nat. Prod.* **2013**, *76*, 394–404.
[3] L. Arce-Ramos, J.-C. Castillo, D. Becerra, *Pharmaceuticals* **2023**. Sometido.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

La 4-estirilquinolina como bloque de construcción de nuevos híbridos moleculares del tipo estirilquinolina-quinazolinona

Juan G. Bernal[a], Diana M. Ardila[a], Diana R. Vera[a], Alirio Palma[a,*] Justo Cobo.[b]

[a] Laboratorio de Síntesis Orgánica, Escuela de Química, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.
[b] Departamento de Química Inorgánica y Orgánica, Universidad de Jaén, España. e-mail: apalma@uis.edu.co

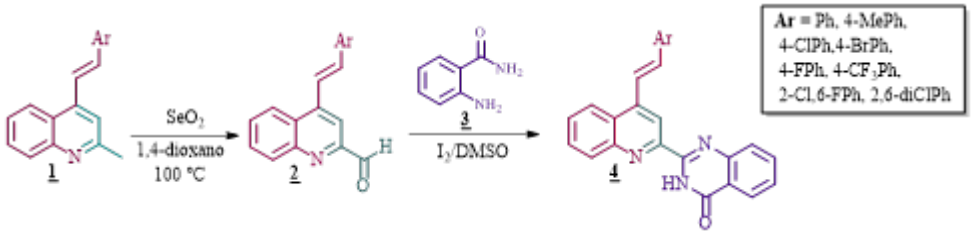
Palabras clave: Estirilquinolinas, quinazolinonas, híbridos moleculares, ciclocondensación.

INTRODUCCIÓN

Los núcleos de la quinolina y la quinazolinona son estructuras altamente valoradas en la investigación y desarrollo de fármacos con diversas aplicaciones terapéuticas.[1–3] Con el objetivo de ampliar los horizontes sintéticos de la reciente metodología de síntesis de la 4-estirilquinolinas desarrollada en el Laboratorio de Síntesis Orgánica de la Universidad Industrial de Santander,[4] se ha llevado a cabo la implementación de una ruta de síntesis de dos etapas separadas para la obtención de nuevos compuestos híbridos que combinan la estructura de la estirilquinolina con la de la quinazolinona. Esta estrategia se basa en los principios de la hibridación molecular y busca generar compuestos con propiedades farmacológicas mejoradas.

MÉTODOS Y RESULTADOS

Se llevó a cabo la síntesis de los nuevos compuestos híbridos estirilquinolina-quinazolinona **4** mediante una ruta de dos pasos secuenciales, tal como se muestra en el ***Esquema 1***. En el primer paso, se obtuvieron las 4-estirilquinolinas **1** a través de la reacción de *Friedländer* entre las 2´-aminochalconas y acetona en presencia de ácido acético a una temperatura de 80 °C.[4] Estas quinolinas se transformaron en sus formil derivados **2**, mediante la oxidación del grupo metilo utilizando SeO_2 en 1,4-dioxano a una temperatura de 100 °C.[5] En el segundo paso, se llevó a cabo una reacción de condensación-ciclación intramolecular oxidativa de los formil derivados **2** con la antranilamida **3** en presencia de DMSO, yodo molecular y aire como fuente de oxígeno.[6] Esta reacción resultó en la formación exitosa de los híbridos moleculares de interés **4**. Empleando esta metodología, se prepararon un total de 10 híbridos, y se presentan por primera vez sus propiedades espectroscópicas y fisicoquímicas en este estudio.



Esquema 1. *Síntesis de los nuevos híbridos (E)-3-aril-2-(4-estirilquinolin-2-il)quinazolin-4(3H)-onas* ***4***

CONCLUSIÓN

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

La metodología de síntesis propuesta ofrece una valiosa opción para la generación de una librería química diversa que incluye híbridos moleculares basados en estirilquinolina-quinazolin-4-ona. Este enfoque aprovecha la accesibilidad de los precursores 4-estiril-2-metil-quinolinas, que pueden obtenerse fácilmente mediante la reacción de Frieldänder.

REFERENCIAS

1. Desai, N. & Dodiya, A. *Arab. J. Chem.*, **7**, 906–913 (2014).
2. Gemma, S. *et al. J Med Chem.*, **55**, 10387–10404 (2012).
3. Cagir, A. *et al. J Am Chem Soc.*, **125**, 13628–13629 (2003).
4. Palma, A. Meléndez, A. *et al. Synthesis.*, **52**, 1804–1822 (2020).
5. Wang, L. *et al. Bioorg Med Chem.*, **23**, 4364–4374 (2015).
6. Bai, X. *et al. Heterocycl Comm.*, **24**, 135–139 (2018).

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Diseño y Síntesis de un Ligando Fotoactivo con Quiralidad Axial Basado en el Núcleo de Fenalenona

Robinson Alzate, Ana Prieto, Felipe Otálvaro *

Síntesis y Biosíntesis de Metabolitos Naturales, Universidad de Antioquia, Colombia
* *Autor de correspondencia: leon.otalvaro@udea.edu.co*

Palabras claves: fenalenona, fotocatálisis, BINAP.

El descubrimiento del 2,2´-bis(diphenylphosphino)-1,1´-binaphthyl (BINAP) a cargo de Noyori y colaboradores en 1980 disparó una revolución en catálisis asimétrica empleando ligandos tipo fosfina con quiralidad axial y estableciendo de paso al BINAP como el ligando más empleado y útil en esta área. Actualmente, la mayoría de los análogos de BINAP reportados se limitan a sustituciones de los hidrógenos del sistema binaftilo, *P*-Ar, o al reemplazo por bi-heteroarilo. Claramente hay oportunidad para la exploración de este espacio químico. En este trabajo proponemos la creación de un ligando diferente con el potencial de fusionar las bondades de la quiralidad axial y la fotocatálisis empleando el núcleo de fenalenona como plantilla (Figura 1). Los elementos de diseño son presentados junto con los avances sintéticos hacia la obtención de este. La estrategia sintética ha sido guiada por principios de facilidad, convergencia y escalamiento.

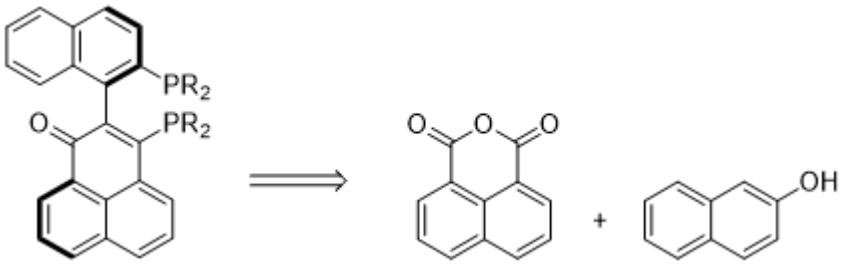


Figura 1. Diseño de un ligando fotoactivo con quiralidad axial.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-170-P ***APROXIMACIÓN SINTÉTICA AMBIENTALMENTE AMIGABLE PARA LA OBTENCIÓN DE IMIDAZOQUINOLINAS Y EXPLORACIÓN DE SU POTENCIAL ACTIVIDAD INHIBITORIA DE COLINESTERASAS***

Aproximación Sintética Ambientalmente Amigable para la Obtención de Imidazoquinolinas y Exploración de su Potencial Actividad Inhibitoria de Colinesterasas

Laura, A Heredia [a], Mónica, C Ávila [b], Cristian, Ochoa [a]*

[a] *Laboratorio de Síntesis Orgánica Sostenible, Universidad Nacional de Colombia, Colombia*
[b] *QUIPRONAB, Universidad Nacional de Colombia, Colombia*
** Autor de correspondencia: cochoapu@unal.edu.co*

Palabras Claves: Imidazoquinolinas, tetrahidroquinolinas, agentes neuroprotectores, colinesterasas.

La enfermedad de Alzheimer (EA), es un trastorno neurodegenerativo multifactorial que se ha convertido en un problema de salud pública mundial, al ser la forma más común de demencia senil.[1] En vista de que no existe un tratamiento eficaz que permita la recuperación o la disminución de los síntomas de la enfermedad, se necesitan investigaciones dirigidas a la búsqueda de agentes terapéuticos más efectivos y de fácil acceso. Por este motivo, estudios recientes han centrado sus investigaciones en la obtención de diferentes compuestos heterocíclicos para el tratamiento de la enfermedad de Alzheimer.[2,3,4] Uno de ellos, son los sistemas imidazoquinolínicos, que han sido desarrollados para el tratamiento de trastornos neurológicos como la enfermedad de Parkinson y el síndrome de piernas inquietas.[5,6] Estos heterociclos tienen diversos derivados estructurales dentro de los cuales se encuentran las 4*H*-imidazo[4,5,1-*ij*]quinolinas; sin embargo, a la fecha no se han encontrado metodologías sintéticas eficientes para su obtención.[7]

En este sentido, este trabajo de investigación se enfocó en la búsqueda de potenciales agentes neuroprotectores orientados a la enfermedad de Alzheimer mediante la síntesis de 5,6-dihidro-4*H*-imidazo[4,5,1-*ij*]quinolinas a partir de 8-nitrotetrahidroquinolinas empleando metodologías ambientalmente amigables. Inicialmente y basados en estudios previos, se evaluó el desempeño de diferentes disolventes eutécticos (DES) en la reacción multicomponente de Povarov para la obtención de 10 derivados de 8-nitrotetrahidroquinolinas (16-96% de rendimiento); y a partir de estos heterociclos se desarrolló la síntesis de 11 análogos de imidazoquinolinas (48-80% de rendimiento) a través de un proceso *one-pot* que involucra una reducción y una ciclocondensación en reacciones asistidas por microondas. Los compuestos obtenidos fueron sometidos a ensayos de *screening primario* para determinar su potencial actividad inhibitoria de colinesterasas empleando concentraciones entre 1 y 100 µM. Los resultados muestran que nueve de las once imidazoquinolinas sintetizadas presentaron actividad inhibitoria de AChE y BuChE en las condiciones usadas en el ensayo.

[1] l. Bertram, R.E. Tanzi, J. Clin. Invest, 2005, 115, 1449–1457 [2] A. Martorana, V. Giacalone, R. Bonsignore, A. Pace, C. Gentile, I. Pibiri, S. Buscemi, A. Lauria, A. Palumbo Piccionello, Curr. Pharm. Des,. 2016, 22 , 3971–3995. [3] C. M. Scorzo, M. L. Fascio, N. B. D'Accorso, M. G. Cabrerab, L. A. Saavedrab, J. Braz. Chem. Soc. 2010, 21, 43–48. [4] S. Morales-Navarro, L. Prent-Peñaloza, Y. A. R. Núñez, L. Sánchez-Aros, O. Forero-Doria, W. González, N. E. Campilllo, M. Reyes-Parada, A. Martínez, D. Ramírez, Process. 2019, Vol. 7, Page 940 2019, 7, 940. [5] P. Barone, J. Lamb, A. Ellis, and Z. Clarke, Mov. Disord., 2007, 22, 483–489. [6] R. B. McCall, K. J. Lookingland, P. J. Bédard, and R. M. Huff, J. Pharmacol. Exp. Ther., 2005, 314, 1248–1256. [7] Z. Mahmoud, M. Daneshtalab, Heterocycles 2012, 85 (11), 33.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Nuevos Hallazgos a Partir de la Reacción de Nazarov

Gabriela Vélez[a],[*] Stephanie García[a], Juan P. Montaño[a], María del P. Crespo[b], Rodrigo Abonia[a].

[a] *Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos, Universidad Del Valle, Colombia.*
[b] *Grupo de microbiología y enfermedades infecciosas. Universidad del valle, Colombia.*
**Autor de correspondencia: gabriela.velez@correounivalle.edu.co*

Palabras clave: Reacción de Nazarov; divinil cetonas; ciclo-penten/buten-onas; fracciones polares; actividad antibacteriana.

Los compuestos que contienen el anillo de la ciclopentenona (CP) son de gran importancia por su presencia en compuestos de origen natural y sintético de interés biológico. Un método para sintetizar CP's funcionalizadas **2** es la ciclación de Nazarov (CN) de divinil cetonas **1** (Figura 1). Se ha reportado en la literatura que la CN solo conduce a CP´s tipo **2**, pero en trabajos recientes de nuestro grupo siguiendo la metodología clásica de la CN, y reemplazando el calentamiento convencional por irradiación con microondas, se encontró, además de las CP´s esperadas **2**, la formación no planeada de las ciclobutenonas **3**. Este hallazgo es un aporte significativo para la Química Orgánica, ya que la CN lleva más de ocho décadas, desde su reporte por primera vez, usándose exclusivamente para la construcción de CP´s tipo **2** y no para otro sistema diferente.

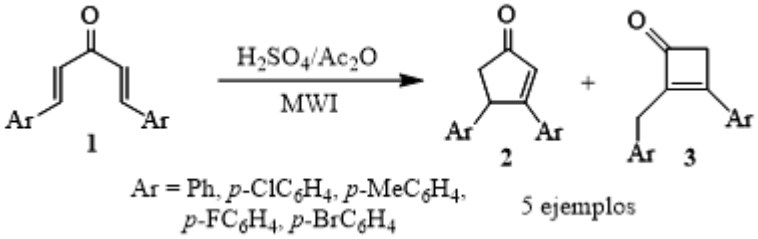


Figura 1. Productos obtenidos a partir de la CN de divinil cetonas **1**.

En un intento de orientar la selectividad de la reacción hacia uno u otro producto **2** o **3**, nuevos ensayos cambiando la MWI por calentamiento convencional y el modo de adición de la mezcla H_2SO_4/Ac_2O, condujeron no solo a los productos **2** y **3**, sino también a otros productos altamente polares en los crudos de reacción; preliminarmente atribuidos a la participación del ácido sulfúrico no solo como catalizador del proceso sino también como reactivo, involucrándose químicamente en la estructura de dichos productos. Se han aislado por cromatografía de columna algunas fracciones de estos nuevos compuestos, pero aún se está en proceso de su completa caracterización. Simultáneamente, se ha realizado un tamizaje biodirigido sometiendo las fracciones de mayor pureza a evaluación de su actividad antibacteriana contra *S. aureus* ATCC 43300 y 25923, *VISA*, *N. gonorrhoeae* ATCC 49226 y estudios in vivo evaluando el nivel de toxicidad en *G. mellonella*, con resultados preliminares bastante satisfactorios. Nos encontramos realizando procedimientos experimentales para elucidar completamente sus estructuras y poder aportar adicionalmente a la mecanística de esta reacción, pero también, para realizar estudios más detallados de su actividad, con la expectativa de que algunos de estos compuestos polares puedan ser explorados como posibles fármacos con aplicaciones terapéuticas en el campo de las infecciones bacterianas.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-172-P ***SÍNTESIS Y EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD TRIPANOCIDA IN VITRO DE COMPUESTOS HETEROCÍCLICOS TIPO ESTIRILQUINOLINAS.***

Síntesis y Evaluación de la Actividad Tripanocida *in vitro* de Compuestos Heterocíclicos Tipo Estirilquinolinas.

Heydy L Rodriguez[a], Roger D Espinosa[a], Sara M Robledo[b], Camilo A Guzmán[a], Gilmar G Santafé[c]

[a]Grupo IDEFARMA, Facultad Ciencias de la Salud, Universidad Córdoba.
[b]Programa Estudio y Control de Enfermedades Tropicales- PECET, Facultad de Medicina, Universidad de Antioquía
[c]Grupo Química de los Productos Naturales, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de Córdoba

Palabras Claves: Estirilquinolinas; Enfermedad de Chagas; Potencial; Citotoxicidad.

Los compuestos con núcleo quinolínico son una unidad estructural de gran importancia por su diversidad de usos farmacológicos, principalmente en el tratamiento de enfermedades protozoarias como la Enfermedad de Chagas (EC). En este contexto, este trabajo tiene como finalidad sintetizar compuestos tipo estirilquinolinas y evaluar su potencial anti-*Tripanosoma cruzi in vitro.* Las estirilquinolinas (Q) se sintetizaron mediante condensación entre 8-hidroxiquinaldina y aldehídos aromáticos. La actividad tripanocida se evaluó frente a cepa de *T. cruzi* Tulahuen, mediante colorimetría. La citotoxicidad se evaluó en línea celular U-937 empleando el micrométodo enzimático con MTT. Se sintetizaron cinco moléculas (*E*)-2-(4-metoxiestiril) quinolin-8-il (Q1), (*E*)-2,6-dimetoxi-4-(2-(quinolin-2-il)vinil)fenil acetato (Q2), (*E*)-2-etoxi-4-(2-(8-hidroxiquinolin-2-il)vinil)fenil acetato (Q3), (*E*)-2-(3-metoxiestiril) quinolin-8-il (Q4) y (*E*)-2-(3-metoxiestiril) quinolin-8-il (Q5) con rendimientos de 63.8%, 41%, 65%, 57% y 43.6 respectivamente. Los compuestos Q1, Q2, Q3 y Q4 mostraron ser citotóxicos frente a línea celular U-935 con valores de Concentración letal media (CL_{50}) de 2.1, 8.8, 2.8 y 2.62 µg/ml respectivamente, mientras que el compuesto Q5 no presento citotoxicidad con un valor de CL_{50} de 200 µg/ml, en comparación con la Doxorrubicina con un valor de CL_{50} de 0.98 µg/mL. Todas las moléculas sintetizadas mostraron alta actividad frente a *T. cruzi* con valores de Concentración Efectiva media (CE_{50}) de 0.99, 5.77, 8.41, 1.30 y 13.65 µg/mL respectivamente, siendo más activas que el medicamento control Benznidazol (BZ) con CE_{50} de 14,7 µg/mL. Los compuestos más activos y selectivos hacia la muerte del parásito son Q1, Q2, Q4 y Q5 con valores de Índices de Selectividad de 2.11, 1.53, 2.62 y >14.65 µg/ml respectivamente (todos IS>1). Los resultados permiten considerar a las moléculas sintetizadas compuestos químicos promisorios como antiparasitarios contra *Tripanosoma cruzi*, agente causante de la enfermedad de Chagas.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-173-P ***SÍNTESIS DE ISOBENZOFURANONAS 3-SUSTITUIDAS MEDIANTE UNA NUEVA METODOLOGÍA ECONÓMICA LIBRE DE DISOLVENTE.***

Síntesis de Isobenzofuranonas 3-Sustituidas Mediante una Nueva Metodología Económica Libre de Disolvente.

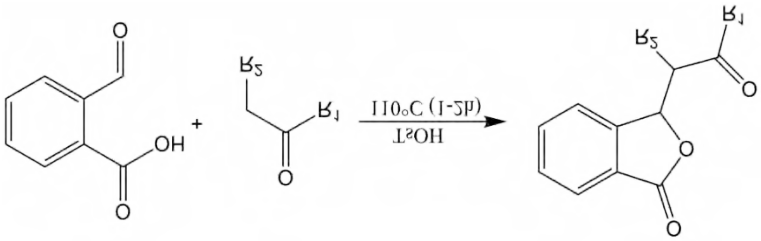
Juan Diego Alarcón Forero[a]*, Christian A. Becerra R.[a], Paola A. Cuervo Prado[a], Fabian Orozco Lopez[a].

[a] *Grupo de Estudios en Síntesis y Aplicaciones de Compuestos Heterocíclicos, Universidad Nacional de Colombia, Colombia.*

* *Autor de correspondencia: jalarconf@unal.edu.co*

Palabras Claves: Isobenzofuranonas; Acetofenonas; Condensación Aldólica; Ácido *p*-Toluensulfónico.

Los derivados de la isobenzofuranona, también conocidos como ftalidas, son compuestos biológicamente activos ampliamente utilizados en la industria farmacéutica debido a sus destacadas propiedades antioxidantes, antitumorales, anticonvulsivas, entre otras[1-3]. A pesar de que se ha investigado previamente la síntesis de estos compuestos 3-sustituidos[4], se plantea un nuevo método que garantice mayor accesibilidad, economía y sostenibilidad ambiental en su obtención. En esta investigación, se han sintetizados seis compuestos tipo 3*H*-isobenzofuranonas mediante esta nueva metodología **Esquema 1**. La síntesis se llevó a cabo a través de la condensación aldólica del ácido 2-formilbenzóico con un compuesto carbonílico enolizable **Tabla 1**, empleando el ácido *p*-toluensulfónico como catalizador. Los rendimientos obtenidos se encuentran entre el 48% y el 70%. Utilizando técnicas de diseño racional de fármacos, se estudió el posible efecto que tendrían estos compuestos en sistemas biológicos. Así mismo, en 5 de estos experimentos se llegaron a compuestos tipo 3-(2-oxo-2-ariletil) isobenzofuran-1(3*H*)-onas, partiendo de acetofenonas *para* sustituidas, por lo que se pudo estudiar el efecto de dichos sustituyentes en la obtención de los productos.



Esquema 1. Síntesis global de los compuestos tipo 3*H*-Isobenzofuranonas

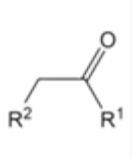
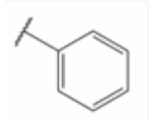
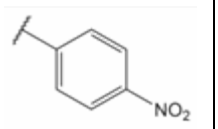
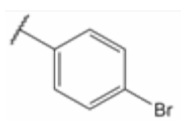
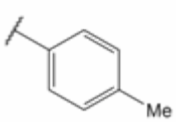
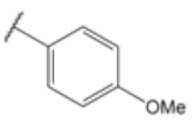
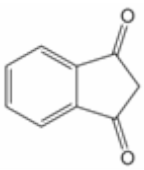
Compuesto		f1	f2	f3	f4	f5	a1
	R^1						
	R^2	H	H	H	H	H	

Tabla 1. Sustituyentes de los compuestos carbonílicos utilizados

[1]Huang, X.-Z.; Zhu, Y.; Guan, X.-L.; Tian, K.; Guo, J.-M.; Wang, H.-B.; Fu, G.-M.. Molecules. *17(4)*, **2017**, 4219-4224
[2]Landge, S.; Berryman, M.; Török, B. Tetrahedron Letters. *49 (29-30)*, **2008**, 4505-4508
[3]Rincon, J.; Guerrero, M.F.; Cardozo, J.A.; Pinzón, R. *Rev. Col. Cienc. Quim. Farm. 32(2)*, **2003**, 141-184
[4]Maleki, B.; Koushki, E.; Baghayeri, M.; Ashrafi, S. S., J. Chil. Chem. Soc. *60*, **2015**, 2822-2826

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Síntesis del flavonoide hipoglucemiante 5,7-dihidroxi-2-(4'-hidroxi-3',5'-dimetoxifenil) croman-4-ona y análogos estructurales

Juan D Sánchez*[a], Gustavo A Escobar [a]
[a] *Química orgánica de productos naturales, Universidad de Antioquia, Colombia*
* *Autor de correspondencia: juan.sanchez34@udea.edu.co*

Palabras Claves: *Jatropha gossypifolia* L; Diabetes; Flavonoide; Flavanona; Síntesis

Jatropha gossypifolia L es una planta popularmente empleada para regular los niveles de glucosa en sangre. Pruebas *in vitro* del extracto metanólico de esta planta demostraron que se mejora la captación de glucosa en miotubos C2C12 resistentes a la insulina en un 27% [1] superior a la metformina, medicamente de amplio uso en pacientes con Diabetes tipo II. Igualmente, del extracto se logró aislar e identificar la flavanona 5,7-dihidroxi-2-(4'-hidroxi-3',5'-dimetoxifenil)-croman-4-ona, quizás la molécula responsable de dicha actividad.

Mediante una condensación aldólica, en medio básico, entre la 2',4',6'-trihidroxiacetofenona y el Siringaldehido (previamente protegidos con MOMCl) se llega a la respectiva 2'-hidroxi chalcona protegida, compuesto que cicla y desprotege, en medio acido, para generar la mencionada flavanona. Esta metodología permitirá, a futuro, obtener una serie de compuestos que permitan no solo evaluar su capacidad de captación de glucosa, sino establecer una posible relación estructura-actividad. (Figura 1)

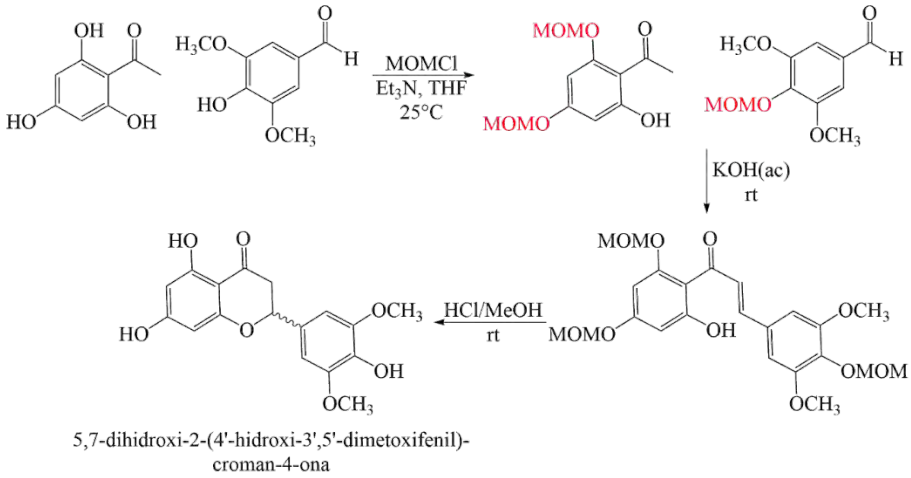


Figura 1. Esquema sintético formación de flavanonas

[1] S. Granados, N. Balcázar, A. Guillén, and F. Echeverri, "Evaluation of the Hypoglycemic Effects of Flavonoids and Extracts from Jatropha gossypifolia L.," *Molecules 2015, Vol. 20, Pages 6181-6193*, vol. 20, no. 4, pp. 6181–6193, Apr. 2015, doi: 10.3390/MOLECULES20046181.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Obtención de β-Ocimeno Mediante Isomerización Fotocatalítica de α-Pineno

Héctor F. Córdoba [a], **Ricardo Benítez** [b], **Jaime Martin** [c], *

[a, b, c] *Química de Productos Naturales, Universidad del Cauca, Colombia*

** Autor de correspondencia: jmartinf@unicauca.edu.co*

Palabras Clave: Aceites esenciales; Terpenos; β-Ocimeno; Isomerización fotocatalítica; Garcinia mangostana

Los aceites esenciales son mezclas de productos naturales procedentes de las plantas con contenido significativo de terpenos y aromas característicos, muy utilizados para proporcionar aromas y sabores específicos en la industria alimenticia y la cosmética. En la manufactura de un número apreciable productos industriales de los sectores mencionados ha sido esencial la participación del monoterpeno acíclico β-ocimeno, un fitocompuesto originado con altibajos en la producción fuera del país y debido a ello generalmente escasea para el consumo externo e interno. Debido a esto, en muchas ocasiones se ha importado la mezcla de diastereoisómeros *E* y *Z*, los cuales presentan propiedades químicas y físicas diferentes.

Una vía para obtener β-ocimeno con eficiencia, sostenibilidad y pureza diastereomérica se ha venido realizando mediante isomerización fotocatalítica del α-pineno. El proyecto de investigación planteado se ha enfocado en este propósito estudiando la participación fotosensibilizadora del extracto de *Garcinia Mangostana* en la transformación de α-pineno en β-ocimeno mediante activación fotoquímica. Inicialmente, se obtuvo el extracto del mangostino mediante un proceso asistido por microondas, obteniendo α-mangostina como principal compuesto. La cromatografía de gases y espectrometría de masas se ha utilizado para monitorear el desarrollo de la reacción evaluando la presencia de los diastereoisómeros del β-ocimeno.

La metodología propuesta incluye un diseño experimental de superficie de respuesta para evaluar diferentes variables como el tiempo, el solvente y el sensibilizador y optimizar la conversión de α-pineno en β-ocimeno. En el estudio exploratorio, se encontró que la elección de la fuente de radiación y la intensidad son factores cruciales para el éxito del proceso.

Los resultados de este proyecto contribuirán a promocionar la industria nacional en cuanto a la obtención de β-ocimeno a partir del α-pineno, un monoterpeno abundante en la región. Además, se reduciría la dependencia de las importaciones y se promovería el desarrollo de la industria química del país. Con la exploración del uso del extracto de mangostino como fotosensibilizador, se podrían establecer nuevas oportunidades de aprovechamiento de los recursos naturales y se estaría impulsando la valorización de subproductos de la industria alimentaria.

Al final, con esta investigación se espera proporcionar una ruta sostenible y eficiente para obtener β-ocimeno con potencial e impacto positivo en la industria cosmética y de alimentos, así como en el desarrollo de tecnologías más limpias y respetuosas con el medio ambiente en la síntesis química.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-176-P ***OBTENCIÓN DE 3-AMINOPIRAZOLO[1,5-A]PIRIMIDINAS: APLICACIÓN SINTÉTICA Y POSTERIOR ESTUDIO FOTOFÍSICO PARA LA DETECCIÓN DE IONES METÁLICOS***

Obtención de 3-Aminopirazolo[1,5-*a*]pirimidinas: Aplicación Sintética y Posterior Estudio Fotofísico para la Detección de Iones Metálicos

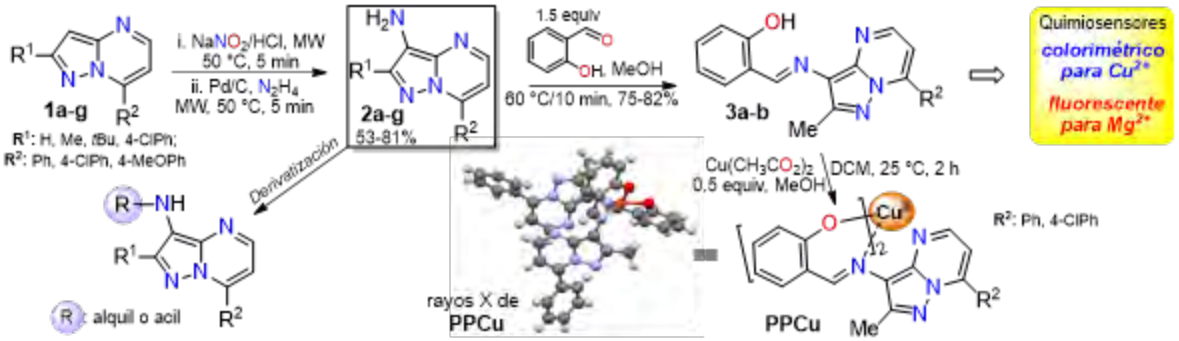
Carlos A. Cifuentes [a,*], Néstor F. Bravo [a], Jaime Portilla [a]

[a] *Grupo de Investigación en Compuestos Bio-orgánicos (GICOBIORG), Departamento de Química, Universidad de los Andes, Carrera 1 No. 18A-10, Bogotá 111711, Colombia.*

* *Autor de correspondencia: c.cifuentese@uniandes.edu.co*

Palabras Clave: Funcionalización; Nitrosación; Pirazolo[1,5-*a*]pirimidina; Quimiosensor; Reducción.

El anillo heteroaromático de pirazolo[1,5-*a*]pirimidina (PP) tiene una estructura plana con una fusión 5:6, hace parte de múltiples compuestos de interés biológico y de algunos fluróforos relevantes para estudios fotofísicos y en ciencia de materiales.[1,2] Sin embargo, su uso en la interacción con iones metálicos (sensores o complejos de coordinación) es limitado a 10 trabajos que solo implican 5 tipos de ligando. Por ello, conviene funcionalizar el anillo en busca de obtener ligandos apropiados para potenciar su aplicación en este campo, con lo cual, se llevó a cabo la síntesis de 3-aminopirazolo[1,5-*a*]pirimidinas **2** mediante reacciones de nitrosación y posterior reducción del intermedio nitrosado bajo microondas, partiendo del respectivo sustrato **1** (Esquema 1).[3-5]



Esquema 1. Síntesis de 3-aminopirazolo[1,5-*a*]pirimidinas **2a-g**, funcionalización y aplicaciones.

Con las heteroarilaminas **3** en la mano, se procedió a realizar su aplicación sintética mediante reacciones de alquilación, amidación y condensación. Finalmente, el producto de la condensación de **3** con salicilaldehido permitió acceder a nuevos ligandos tipo Salen que posibilitaron obtener un complejo de coordinación de cobre (II), un sensor fluorescente para Mg^{2+} y uno colorimétrico para cobre (II), Esquema 1. Los productos fueron caracterizados por espectroscopia de RMN, espectrometría de masas de alta resolución (HRMS) y afortunadamente, se logró establecer la estructura por cristalografía de rayos X del complejo tipo salen **PPCu**.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-177-P SÍNTESIS DE COMPUESTOS HÍBRIDOS DE PIRAZOLINA–CUMARINA COMO NUEVOS QUIMIOSENSORES PARA LA DETECCIÓN DE IONES METÁLICOS

Síntesis de Compuestos Híbridos de Pirazolina–Cumarina como Nuevos Quimiosensores para la Detección de Iones Metálicos

Nestor F. Bravo [a,*], **Jaime A. Portilla** [a],

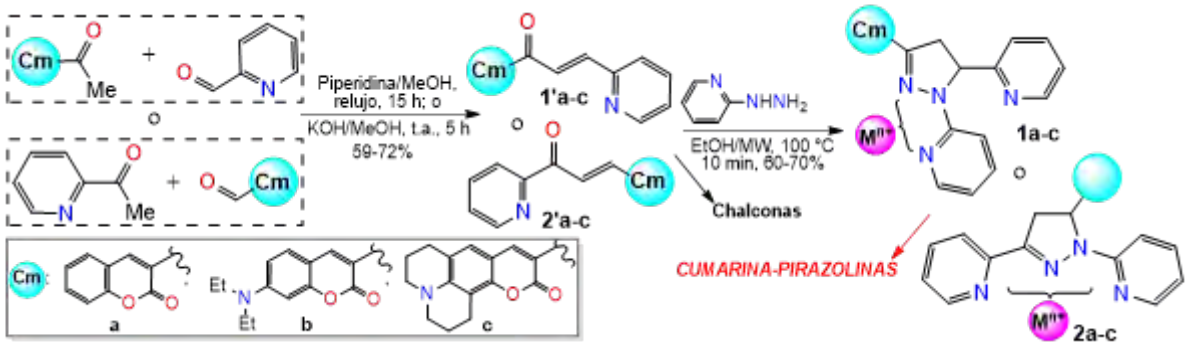
[a] *Grupo de Investigación en Compuestos Bio-orgánicos (GICOBIORG), Departamento de Química, Universidad de los Andes, Carrera 1 No. 18A-10, Bogotá 111711, Colombia.*

* *Autor de correspondencia: nf.bravo@uniandes. edu.co.*

Palabras clave: Cumarina; Pirazolina; Quimiosensor; Propiedades fotofísicas; Detección de metales

Los efectos perjudiciales de los metales en el medioambiente son numerosos y, debido a su presencia en entornos biológicos, se han presentado diversos problemas respiratorios, digestivos y renales, entre otros.[1] Al respecto, se ha estudiado ampliamente el monitoreo de estas especies utilizando procesos altamente eficientes y sensibles, a pesar de que proceden con equipos costosos y protocolos tediosos desarrollados en periodos de tiempo prolongado.[2] Esto ha despertado el interés en nuestro grupo hacia la síntesis de compuestos novedosos, de notables propiedades fotofísicas y arquitectura molecular útil para el desarrollo de sondas moleculares (quimiosensores)[3] que permitan detectar iones metálicos con simplicidad operacional en matrices adecuadas para aplicarlos a nivel biológico y/o ambiental.

Con base en lo anterior, se sintetizaron los compuestos híbridos **1a-c** y **2a-c**, que poseen fluoroforos de cumarina y pirazolina sustituidas con grupos 2-piridilo dispuestos de manera apropiada, en busca de evaluar su alcance en la detección de iones metálicos (Esquema 1). La estructura de los compuestos se caracterizó vía espectroscopía de RMN, de UV-Vis y de fluorescencia, y por espectrometría de masas. Los estudios fotofísicos (absorción y emisión) se hicieron en disolventes de diversa polaridad (solvatofluorocromismo), se encontraron rendimientos cuánticos con valores similares al estándar prodan y se pudu estudiar la detección de algunos iones metálicos (Zn, Ni y Cu). Estos resultados aportan al desarrollo de futuras generaciones de quimiosensores versátiles, sensibles y selectivos.



Esquema 1. Síntesis de 1-(2-piridil)pirazolinas **1a-c** y **2a-c**

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-178-P SÍNTESIS ECO-AMIGABLE DE 5-AMINOPIRAZOLES UTILIZANDO ISOXAZOLES COMO INTERMEDIOS ESTRATÉGICOS

Síntesis Eco-Amigable de 5-Aminopirazoles Utilizando Isoxazoles como Intermedios Estratégicos

María C. Ríos [a,*], **Jaime A. Portilla** [a]

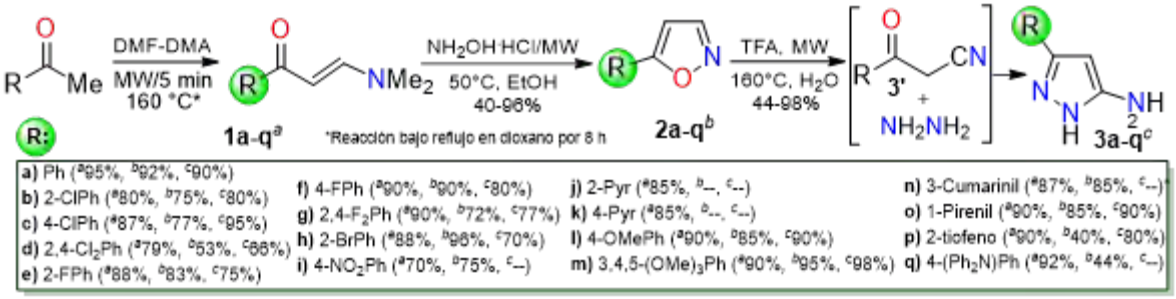
[a] *Grupo de Investigación en Compuestos Bio-orgánicos (GICOBIORG), Departamento de Química, Universidad de los Andes, Carrera 1 No. 18A-10, Bogotá 111711, Colombia.*

* *Autor de correspondencia: mc.rios@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: Isoxazoles; 5-Aminopirazoles; Síntesis Ecológica; Microondas.

Los isoxazoles son un grupo particular de azoles porque poseen un anillo de carácter π-deficiente, por lo que se estudian poco como sustratos heteroaromáticos en diversas síntesis; sin embargo, algunos derivados reaccionan en la presencia bases o nucleófilos formando productos de apertura de anillo de mayor valor sintético. En efecto, se ha encontrado que los 3-arilisoxazoles son útiles como sustratos 1,3-*bis*-electrofílicos para formar 5-amino-3-arilpirazoles al reaccionar con hidrazinas, los cuales son heteroaminas de alto valor agregado.[1,2]

Por lo tanto, conviene estudiar a fondo este enfoque para hacerlo más eficiente y amigable con el medioambiente en la obtención de 5-aminopirazoles **3a-q** mediante los isoxazoles **2a-q** (Esquema 1). Este enfoque permitió acceder a las aminas **3a-q**, que son de difícil acceso desde el costo de los precursores y accesibilidad de los reactivos, hasta el alto precio de algunas pocas que son comerciales. Los 5-amino-3-arilpirazoles **3a-q** se caracterizaron por espectroscopía de RMN (^{1}H, ^{13}C, ^{135}DEPT) y espectrometría de masas de alta resolución (HRMS). Adicionalmente, se hizo un acercamiento al mecanismo de la reacción mediante cálculos computacionales DFT (m08HX), encontrando que la reacción se favorece vía un conocido aroilacetonitrilo intermedio (**3'**).



Esquema 1. Ruta sintética para la obtención de los derivados **3a-q**

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-179-P ***SÍNTESIS DE NUEVOS DERIVADOS DE ESPIRO[PIRIMIDO[4,5-B]QUINOLINA-5,5'-PIRROLO[2,3-D]PIRIMIDINA]-TRIONAS Y ESPIRO[INDOLINA-3,5'-PIRIDO[2,3-D:6,5-D']DIPIRIMIDINA]-TRIONAS MEDIANTE UNA REACCIÓN PSEUDO-TRICOMPONENTE***

Síntesis de Nuevos Derivados de Espiro[pirimido[4,5-b]quinolina-5,5'-pirrolo[2,3-d]pirimidina]-trionas y Espiro[indolina-3,5'-pirido[2,3-d:6,5-d']dipirimidina]-trionas Mediante una Reacción Pseudo-tricomponente

Stiven Ramírez[a,]*, Jairo Quiroga[a]

[a] *Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos, Universidad del Valle, Colombia*
** Autor de correspondencia: ramirez.yonier@correounivalle.edu.co*

Palabras clave: Reacción pseudo-tricomponente; espiro[pirimidoquinolinapirrolopirimidina]triona; espiro[indolinapiridodipirimidina]triona; isatinas N-sustituidas.

Los núcleos de indol y quinolina son estructuras heterocíclicas notables que sirven como base para una amplia gama de compuestos biológicamente activos, lo que genera un interés significativo en el descubrimiento de fármacos y la química médica. Los derivados del indol exhiben un amplio espectro de actividades biológicas, que van desde potentes propiedades anticancerígenas, efectos neuroprotectores y acciones antiinflamatorias, hasta eficacia antimicrobiana y modulación de los receptores de serotonina. Por otro lado, los compuestos que presentan el núcleo de quinolina también han mostrado potencial como agentes anticancerígenos, agentes antibacterianos y antifúngicos, compuestos antiinflamatorios y candidatos para la investigación neurológica y psiquiátrica. Dicho esto, en este trabajo se llevó a cabo la síntesis de nuevos compuestos que contienen estos dos núcleos prometedores mediante una reacción pseudo-tricomponente. Por un lado, se sintetizaron dos series de derivados espiro[pirimido[4,5-b]quinolina-5,5'-pirrolo[2,3-d]pirimidina]-trionas **(11)** a partir de las isatinas **(1-2)** y las aminopirimidonas **(6-9)** y el 6-amino-1,3-dimetiluracilo **(10)**; por otro lado, se obtuvieron tres series de derivados de espiro[indolina-3,5'-pirido[2,3-d:6,5-d']dipirimidina]-trionas **(12)** a partir de las isatinas **(3-5)** como se muestra en la *Figura 1*. Las estructuras se establecieron mediante espectroscopia (FT-IR y RMN) y espectrometría de masas. De esta manera, se logró obtener de forma rápida y sencilla todos estos compuestos con alta estabilidad mediante una reacción de reflujo, los cuales podrán ser evaluados posteriormente para determinar el potencial de su actividad biológica.

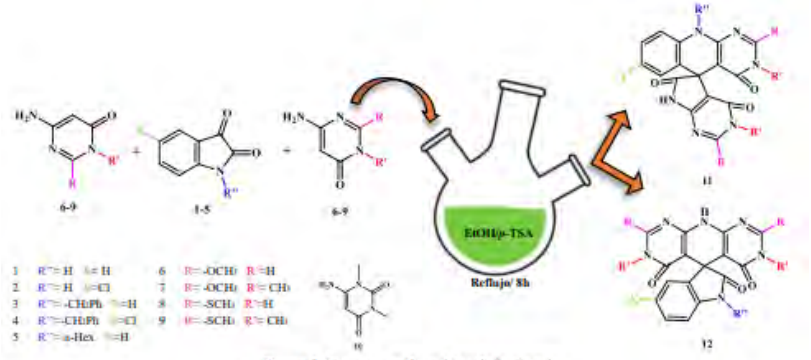


Figura 1. Representación gráfica de la síntesis.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Avances en la Síntesis de Lachnanthopyrone

Evelyn Numpaque, Felipe Otálvaro *

Síntesis y Biosíntesis de Metabolitos Naturales, Universidad de Antioquia, Colombia
* *Autor de correspondencia: leon.otalvaro@udea.edu.co*

Palabras claves: Haemodoraceae, anhídrido vinílogo, pirona, diarilheptanoides, fotocatálisis

Lachnanthopyrone (7-fenil-5-hidroxi-1*H*,6*H*-benzo[*de*]isocromen-1,6-diona) es un compuesto asilado de plantas del género Lachnantes (Haemodoraceae) el cual representa un punto de diversificación biosintética a compuestos tipo anhídridios fenilnaftálicos y alcaloides con núcleo azafenalenónico. A nivel estructural, este compuesto concatena un grupo anhídrido vinílogo con un sistema diosfenol que le confiere una reactividad única capaz de acilar péptidos a condiciones fisiológicas. Infortunadamente, su aislamiento de fuentes naturales es tedioso, de bajo rendimiento y a la fecha no se reporta ninguna síntesis, lo que ralentiza cualquier exploración tanto a nivel químico como biológico. En este trabajo se presentan avances en la síntesis de Lachnanthopyrone empleando una estrategia parcialmente inspirada en principios biosintéticos de fenilfenalenonas y que plantea como reacción clave la ciclización de un éster análogo de diarilheptanoide (Figura 1). Este último ha sido obtenido en 4 pasos (secuencia lineal más larga) partiendo de cinnamaldehído y vainillina.

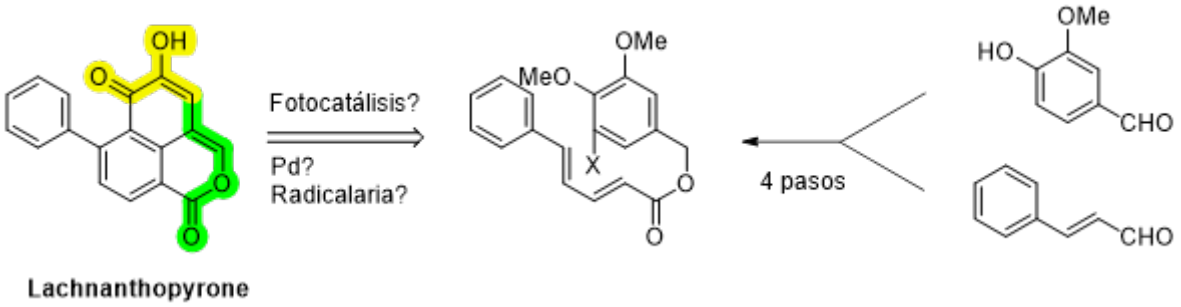


Figura 1. Estrategia sintética para la obtención de Lachnanthopyrone e indicación de avances

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-181-P ***SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NUEVOS HÍBRIDOS MOLECULARES (E)-1-ARIL-3-(4-((E)-ESTIRIL)QUINOLIN-2-IL)PROP-2-EN-1-ONAS***

Síntesis y caracterización de nuevos híbridos moleculares (*E*)-1-aril-3-(4-((*E*)-estiril)quinolin-2-il)prop-2-en-1-onas

Geraldine Alvarez[a], Diana Vera Alarcón[a], Diego F. Rodríguez[a], Kelly J. López[a], Alirio Palma[a,*] Justo Cobo[b].

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

[b]*Departamento de Química Inorgánica y Orgánica, Universidad de Jaén, España.*

[*]*e-mail:* apalma@uis.edu.co

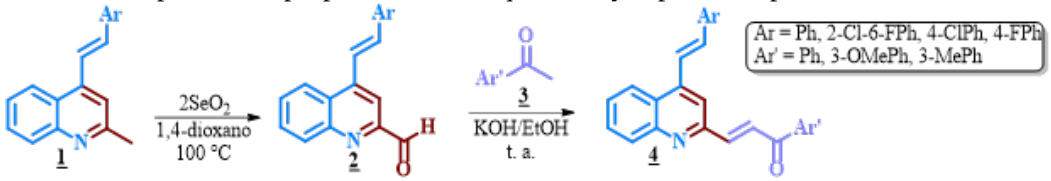
Palabras Claves: Quinolina, chalcona, híbridos moleculares, condensación de *Claisen-Schmidt*.

INTRODUCCIÓN

El anillo de la quinolina hace parte de los heterociclos nitrogenados que son considerados como estructuras privilegiadas, esto debido al extenso número de propiedades biológicas exhibidas por muchos de sus derivados.[1] Se ha evidenciado también que la conjugación de este núcleo con otros fragmentos farmacofóricos, como la subunidad chalcona, da origen a nuevos entes moleculares con propiedades biológicas similares o mejoradas a las de sus precursores.[2] Teniendo en cuenta lo anterior y con el propósito de ampliar los alcances sintéticos de la metodología de síntesis de 4-estirilquinolinas recientemente desarrollada en el LSO de la UIS,[3] en el presente trabajo se describe la implementación de una ruta de síntesis de dos pasos para acceder a nuevos compuestos híbridos del tipo estirilquinolinil-chalcona.

METODOLOGÍA

La construcción de los nuevos híbridos moleculares estirilquinolinil-chalcona **4** se realizó mediante una ruta sintética de dos pasos representada en el **Esquema 1**. En el primer paso, las 4-estirilquinolinas **1**, previamente preparadas mediante la reacción de *Friedländer* entre las 2'-aminochalconas y la acetona en ácido acético a 80 °C,[3] fueron transformadas en las correspondientes 2-formilquinolinas **2** por oxidación del grupo metilo con SeO_2 en 1,4-dioxano a 100 °C.[4] En el segundo paso, se llevó a cabo la condensación de *Claisen-Schmidt* de los formilderivados **2** con derivados de la acetofenona empleando solución etanólica de KOH como catalizador a temperatura ambiente, lo que resultó en la formación efectiva de los híbridos moleculares de interés **4**. Haciendo uso de esta metodología, se prepararon 9 representantes del tipo **4**, para los cuales, por primera vez, se reportan sus propiedades fisicoquímicas y espectroscópicas.



Esquema 1. Síntesis de los nuevos híbridos (*E*)-1-aril-3-(4-((*E*)-estiril)quinolin-2-il)prop-2-en-1-onas **4**.

CONCLUSIONES

La metodología aquí descrita posibilita la construcción de nuevos híbridos moleculares del tipo (*E*)-1-aril-3-(4-((E)-estiril)quinolin-2-il)prop-2-en-1-onas **3** a partir de las 2-metil-4-estirilquinolinas **1** empleando como herramienta sintética clave la condensación de *Claisen-Schmidt*.

BIBLIOGRAFÍA

1. Kumar, S., Bawa, S., & Gupta, H. (2009). *Mini Rev. Med. Chem.*, 9(14), 1648–1654.
2. Atukuri, D., *et al*. (2020). *Bioorg. Chem.*, 105, 104419.
3. Palma, A., *et al*. (2020). *Synthesis*, 52(12), 1804–1822.
4. Wang, L., *et al*. (2015). *Bioorg. Med. Chem.*, 23(15), 4364–4374.

AGRADECIMIENTOS. Este trabajo fue financiado por la Vicerrectoría de Investigación y Extensión de la UIS, proyecto 3918.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Síntesis de Cinamidas Derivadas de 4-piridincarboxaldehído con Posible Actividad Antibacteriana

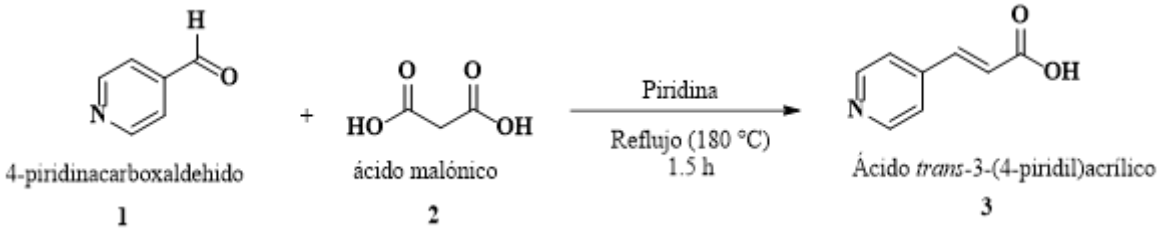
Valentina Flórez Muñoz [a], Andrés F. Guerrero [b], Luis A. Illicachi [c], *

[a,b] Centro de Investigación, Universidad Santiago de Cali, Colombia

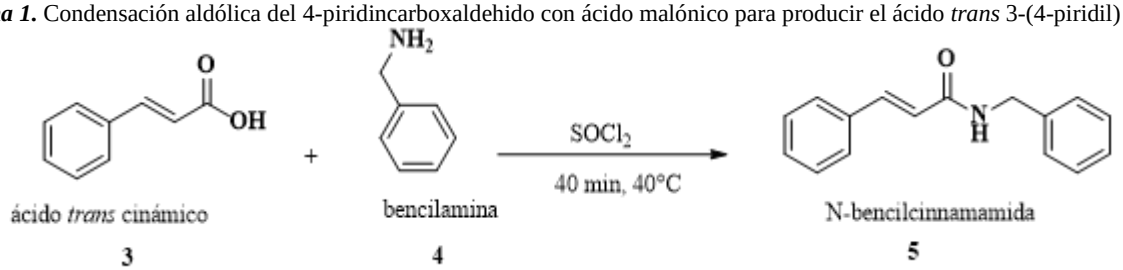
** Autor de correspondencia: luis.illicachi00@usc.edu.co*

Palabras Claves: Cinamida; actividad antimicrobiana; condensación de Knoevenagel; aldehídos aromáticos.

Después de centrar esfuerzos en mitigar la proliferación del Covid-19, se ha producido un aumento en la resistencia de diversos patógenos infecciosos, que están en continuo crecimiento. Los fármacos actuales son poco eficientes contra la evolución y adaptación de estos entes contagiosos. Por lo que se llevó a cabo la síntesis de un nuevo compuesto (**5**) cinamida con posible actividad antibacteriana, a partir de aldehídos aromáticos comerciales **(1)** y ácido malónico **(2)** para obtener el ácido correspondiente **(3)** por medio de una reacción de condensación de Knoevenagel, con este producto y aminas aromáticas halogenadas **(4)**, inicialmente se realizó la síntesis para la obtención de cinamidas mediante la metodología de one-pot. La obtención del enlace amido está fuertemente promovido por la acilación del grupo acido carboxílico (-COOH), dado por el uso de cloruro de tionilo como agente clorante, siendo más reactivo al momento de formar el enlace C-N. La reacción con cloruro de tionilo es óptima, por la poca cantidad de tiempo en la que reacciona con la amina.



Esquema 1. Condensación aldólica del 4-piridincarboxaldehido con ácido malónico para producir el ácido *trans* 3-(4-piridil) acrílico.



Esquema 2. Síntesis de amidas a partir de ácidos carboxílicos mediante one-pot, usando cloruro de tionilo.

Con las condiciones correctas, la reacción de Knoevenagel puede llegar a ser un método rentable para la síntesis orgánica de compuestos α,β-insaturados, debido a los altos porcentajes de rendimiento que se pueden obtener en ensayos experimentales. La caracterización del ácido *trans*-3-(4-piridil) acrílico sé realizó por medio de espectroscopia de

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

infrarrojo (IR), espectrometría de masas (MS) y difracción de rayos X (DRX) debido a que el producto era un sólido cristalino.

Referencias

1. Hoai, N. T.; Ngoc, T. T. Y.; Nam, N. D.; Thuy, T. T.; Trang, C. T. T.; Hai, N. D.; Nguyen, T. K. Effect of β-Alanine on the Preparation of 4-Ethoxy-Cinnamic Acid. Open Mater. Sci. J. 2018, 12 (1), 58–67. https://doi.org/10.2174/1874088X01812010058

2. Duan, Y.; Li, Z.; Tang, Q.; Li, R.; Xu, S. Synthesis of 4-Chloro-N, N-Dimethyl Pyridine Car Box Amide. Proc. 2016 7th Int. Conf. Educ. Manag. Comput. Med. (EMCM 2016) 2017, 59 (Emcm 2016), 591–594. https://doi.org/10.2991/emcm-16.2017.111.

3. Leggio, A.; Belsito, E. L.; De Luca, G.; Di Gioia, M. L.; Leotta, V.; Romio, E.; Siciliano, C.; Liguori, A. One-Pot Synthesis of Amides from Carboxylic Acids Activated Using Thionyl Chloride. RSC Adv. 2016, 6 (41), 34468–34475. https://doi.org/10.1039/c5ra24527c.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-183-P SÍNTESIS DE NUEVOS DERIVADOS DE LA ISATIDA A PARTIR DE ISATINAS Y CARBURO DE CALCIO COMO C2-SINTÓN

Síntesis de Nuevos Derivados de la Isatida a partir de Isatinas y Carburo de Calcio como C_2-Sintón

Alejandro Cortés-Lobo [a], Karen J. Ardila-Fierro [a], José G. Hernández [a]*

[a] *Grupo de Investigación Ciencia de los Materiales (CIENMATE), Universidad de Antioquia, Colombia*

* *Autor de correspondencia: joseg.hernandez@udea.edu.co*

Palabras Claves: Acoplamiento Glaser-Hay; carburo de calcio; etinilación; isatina; isatida

Tradicionalmente el acetileno (C_2H_2) ha sido uno de los sintones de tipo C_2 más usados en síntesis química. Sin embargo, al ser un gas altamente inflamable su uso requiere de instrumentación y habilidades especiales que limitan su aplicación. Como alternativa, el uso del carburo de calcio (CaC_2) como C_2-sintón ha venido ganando popularidad debido a que además de ser un material sostenible,[1] su naturaleza sólida facilita su manipulación.[2] En este trabajo de investigación estudiamos la reacción entre isatinas y el CaC_2 para obtener derivados 3-etinil y 3-di-etinil de la isatida (**Figura 1**). La importancia de estos nuevos productos radica en la presencia del fragmento 3-hidroxi-2-oxoindol, una estructura privilegiada en el campo de la química medicinal y en la ciencia de materiales para la construcción de nuevos derivados cumulénicos.

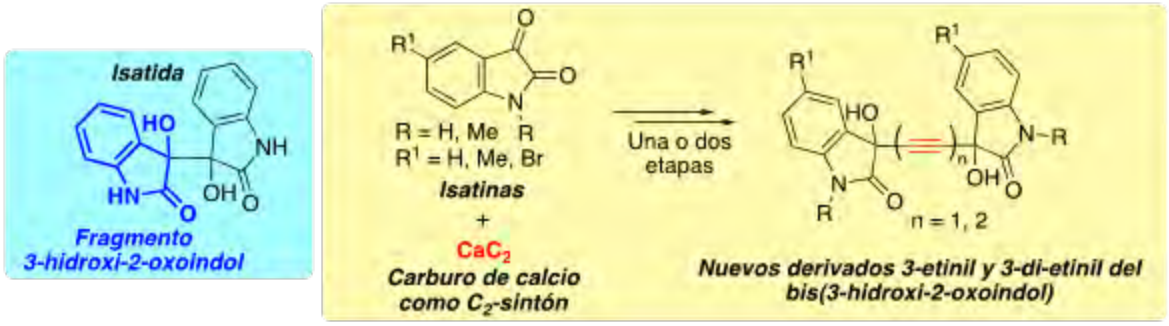


Figura 1. Derivados 3-etinil y 3-di-etinil de la bis(3-hidroxi-2-indolidona) como análogos estructurales de la isatida.

La síntesis de los nuevos derivados que contienen un fragmento etinil requirió un paso sintético a partir de las isatinas y el CaC_2 mientras que los análogos di-etinil fueron preparados en dos etapas que incluyeron la formación de los correspondientes 3-etinil-3-hidroxi-2-oxoindoles,[3] seguido de su acoplamiento tipo Glaser-Hay en presencia de CuCl y tetrametiletilendiamina. En este poster se presentarán los detalles de la síntesis, los esfuerzos para escalar el protocolo y la caracterización estructural de los nuevos productos por espectroscopía infrarroja, resonancia magnética nuclear, etc.

[1] K. S. Rodigyn, Y. A. Vikenteva, V. P. Ananikov, *ChemSusChem* **2019**, *12*, 1483.
[2] K. J. Ardila-Fierro, C. Bolm, José G. Hernández, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 12945.
[3] R. Qi, Z. Li, *Synth. Commun.* **2022**, *52*, 2241.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-184-P ***OPTIMIZACIÓN DE LA SÍNTESIS DE DERIVADOS TERPIRIDÍNICOS BAJO LA RUTA DE KRÖHNKE ASISTIDA POR IRRADIACIÓN CON MICROONDAS***

Optimización de la Síntesis de Derivados Terpiridínicos Bajo la Ruta de Kröhnke Asistida por Irradiación con Microondas

Daniel A. Fajardo [a], Luis A. Lenis [a,] *, Danny A. Arteaga [a]

[a] Grupo de Investigación Química de Productos Naturales (QPN), Universidad del Cauca, Colombia
** Autor de correspondencia: albertolenis@unicauca.edu.co*

Palabras Claves: 2,2’:6’,2’’-terpiridinas; reacción de Kröhnke; irradiación microondas; síntesis orgánicas; diseño experimental.

Las 2,2’:6’,2’’-terpiridinas (2-Tpys) presentan una distribución convergente generada por los átomos de nitrógeno de sus tres anillos piridínicos, permitiéndoles actuar como ligandos tridentados capaces de quelar cationes metálicos [1], generando complejos coordinados útiles en el diseño de arquitecturas moleculares que permitan la fabricación de quimiosensores [2], sondas luminiscentes [3], OLEDs [4], entre otros. Con esto, es clara la necesidad de definir una ruta de síntesis que permita obtener estos compuestos con buenos rendimientos y cuyas condiciones de reacción estén en concordancia con los principios de la Química Verde. De este modo, la reacción de Kröhnke es quizás la ruta sintética más usada para obtener derivados de 2,2’:6’,2’’-terpiridinas como las 4'-aril-2,2':6',2"-terpiridinas [5]. Aunque esta ruta llevada a cabo por medio de calentamiento convencional (CC), normalmente genera rendimientos bajos mediante tiempos altos de reacción [6, 7] por lo que la búsqueda de fuentes de calentamientos alternativos y que sean más amigables con el medio ambiente, se hace necesario.

Por ende, en este trabajo se llevó a cabo la síntesis de tres derivados terpiridínicos (**8**, **9** y **10**) bajo la reacción de 2-acetilpiridina con aldehídos aromáticos mediante la ruta de Kröhnke y calentamiento por irradiación microondas (IMO) proporcionado por un microondas casero modificado, evaluando las mejores condiciones de potencia de microondas (PMO) y tiempo de irradiación (TI) bajo un diseño factorial 2x3 obteniendo rendimientos de 68.97±0.09% para **8**, 57.26±0.08% para **9** y 48.91±0.08% para **10**. Adicionalmente se realiza un análisis comparativo usando el equipo Milestone FlexiWAVE, diseñado para síntesis orgánica asistida por microondas (rendimientos de 69.95±0.24% para **8**, 57.84±0.08% para **9** y 49.31±0.22% para **10**), encontrando que ambos equipos generan rendimientos consistentes entre sí y mayores a los obtenidos por CC (rendimientos de 68.81±0.20% para **8**, 48.28±0.09% para **9**, 44.21±0.08% para **10**). Finalmente, 8-10 fueron caracterizados por medio de técnicas espectroscópicas y epectrométricas: FTIR, UV-Vis, RMN ^{1}H, RMN ^{13}C, DEPT135 y MS además de sus puntos de fusión, confirmando la correcta obtención de estos compuestos. Con todo lo anterior, se define que la ruta planteada permite obtener 8-10 con buenos rendimientos y bajos tiempos de reacción haciendo uso de calentamiento por IMO.

Agradecimientos

Este trabajo fue realizado gracias al apoyo del Grupo de Investigación Química de Productos Naturales (QPN), del Departamento de Química en el marco del proyecto con ID-5407, financiado por la Vicerrectoría de Investigaciones (VRI) de la Universidad del Cauca (501100005682).

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Referencias

[1] Husson, J., & Knorr, M. (2012). Syntheses and applications of furanyl-functionalised 2,2':6',2''-terpyridines. Beilstein Journal of Organic Chemistry, 8, 379–389. https://doi.org/10.3762/bjoc.8.41

[2] He, G., Zhao, L., Chen, K., Liu, Y., & Zhu, H. (2013). Highly selective and sensitive gold nanoparticle-based colorimetric assay for PO43- in aqueous solution. Talanta, 106, 73–78. https://doi.org/10.1016/j.talanta.2012.11.064

[3] Elmes, R. B. P., Erby, M., Bright, S. A., Williams, C. C., & Gunnlaugsson, T. (2012). Photophysical and biological investigation of novel luminescent Ru(ii)-polypyridyl-1,8-naphthalimide Tröger's bases as cellular imaging agents. Chemical Communications, 48(20), 2588–2590. https://doi.org/10.1039/c2cc17274g

[4] Wu, K. Q., Guo, J., Yan, J. F., Xie, L. L., Xu, F. B., Bai, S., Nockemann, P., & Yuan, Y. F. (2011). Alkynyl-bridged ruthenium(II) 4′-diferrocenyl-2,2′:6′, 2″-terpyridine electron transfer complexes: Synthesis, structures, and electrochemical and spectroscopic studies. Organometallics, 30(13), 3504–3511. https://doi.org/10.1021/om200113d

[5] Sasaki, I. (2016). Recent Uses of Kröhnke Methodology: A Short Survey. In Synthesis (Germany) (Vol. 48, Issue 13, pp. 1974–1992). Georg Thieme Verlag. https://doi.org/10.1055/s-0035-1561974

[6] Arteaga, D. A. (2014). Diseño, síntesis y estudios electrónicos de nuevos sistemas fotoactivos basados en el modelo dador-π-aceptor y su aplicación en electrónica orgánica y en celdas solares sensibilizadas por pigmentos [Tesis Doctoral]. Santiago de Cali: Universidad del Valle.

[7] Wang, J., & Hanan, G. S. (2005). A facile route to sterically hindered and non-hindered 4′-aryl-2, 2′:6′,2″-terpyridines. Synlett, 8, 1251–1254. https://doi.org/10.1055/s-2005-868481

I-185-P ***SÍNTESIS Y ESTUDIOS DE LA OXIDACIÓN CON OXÍGENO AMBIENTAL DE 1,3,5-TRIARIL-4,5-DIHIDRO-1H-PIRAZOLES.***

Síntesis y Estudios de la Oxidación con Oxígeno Ambiental de 1,3,5-Triaril-4,5-Dihidro-1*H*-Pirazoles.

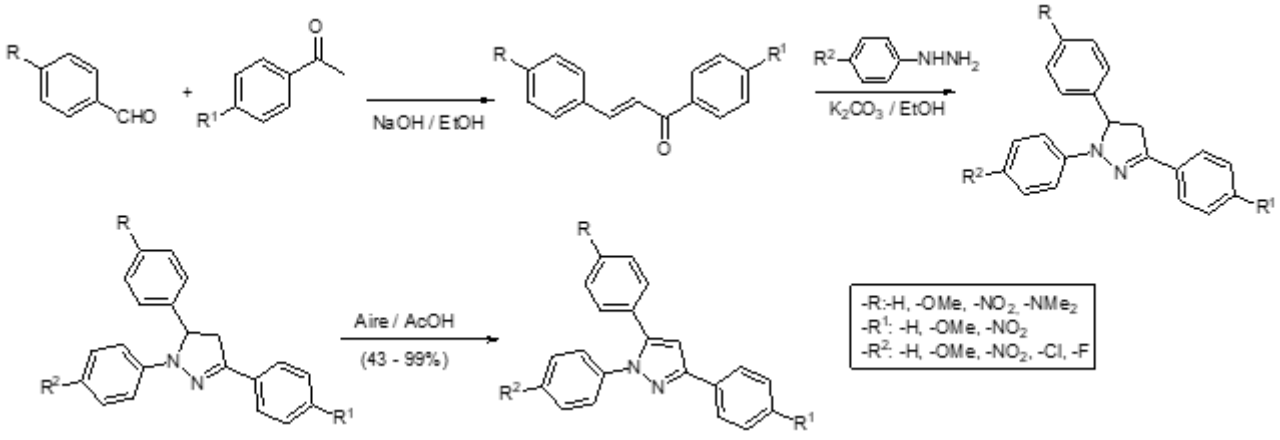
Christian A. Becerra Rivas[a]*, Paola A. Cuervo Prado[a], Fabian Orozco Lopez[a].

[a] *Grupo de Estudios en Síntesis y Aplicaciones de Compuestos Heterocíclicos, Universidad Nacional de Colombia, Colombia.*

** Autor de correspondencia: chabecerrari@unal.edu.co*

Palabras Claves: Oxidación; 4,5-dihidropirazoles; aromatización; oxígeno ambiental.

Los compuestos de tipo pirazol polisustituidos resultan interesantes para la química medicinal dadas sus potenciales aplicaciones, especialmente como agentes antioxidantes[1] y anticancerígenos,[2,3] además de sus interesantes características ópticas de luminiscencia a 254 y 365nm.[4] Por esta razón, la búsqueda de nuevas metodologías sintéticas enmarcadas dentro de los preceptos de la química verde para la obtención de estos núcleos heterocíclicos resulta de interés en miras de ampliar el espacio químico. Con esto en mente, se realizó la síntesis de 7 compuestos 1,3,5-triaril-4,5-dihidro-1*H*-pirazólicos mediante una estrategia de ciclocondensación de aril hidrazinas con compuestos tipo chalcona con buenos rendimientos. Estos compuestos fueron sometidos a procesos de oxidación mediante diversas condiciones, encontrándose que mediante el burbujeo de aire en medio ácido débil se puede lograr la aromatización de los sustratos con rendimientos superiores al 43% y cuya cinética depende de la naturaleza electrónica de los sustituyentes de los sistemas bencenoides enlazados al heterociclo central. Lo anterior condujo al desarrollo de una metodología libre de agentes oxidantes polihalogenados, nitro-arenos o quinonas (usados ampliamente en estos procesos), los cuales son nocivos para el medio ambiente (Esquema 1).



Esquema 1. Síntesis global de los 1,3,5-triarilpirazoles objetivo.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

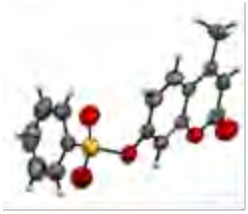
I-186-P ***ANÁLISIS ESPECTROSCÓPICO Y CRISTALOGRÁFICO DEL BENCENOSULFONATO DE 4-METIL-2-OXO-2H-CROMEN-7-ILO***

Análisis Espectroscópico y Cristalográfico del Bencenosulfonato de 4-Metil-2-oxo-2*H*-cromen-7-ilo

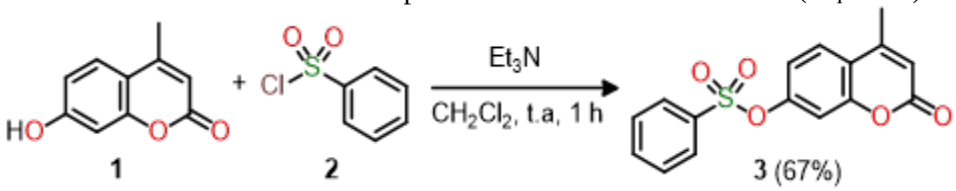
Luis A. Pulido [a], Andrés F. Parra [a], Brayan A. Ladino [a], Mario A. Macías [b], Juan C. Castillo [a,*]

[a] *Electiva Disciplinar V, Escuela de Ciencias Químicas, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Colombia*
[b] *Grupo de Cristalografía y Química de Materiales, Departamento de Química, Universidad de los Andes, Colombia*
** Autor de correspondencia: juan.castillo06@uptc.edu.co*

Palabras Claves: 7-Hidroxi-2H-cromen-2-ona; O-sulfonación; espectroscopia; cristalografía



En los últimos años, las cumarinas, también conocidas como 2*H*-cromen-2-onas, han despertado un gran interés en los campos de la química medicinal y el diseño de fármacos debido a su amplio espectro de actividades biológicas, que incluyen propiedades anticancerígenas, antibacteriales, antivirales, antifúngicas, antioxidantes, anti-inflamatorias, anticoagulantes, entre otras [1,2]. En particular, se han explorado diversas estrategias sintéticas para la funcionalización del grupo hidroxilo de las 7-hidroxi-2*H*-cromen-2-onas [2]. *Para abordar este desafío, se llevó a cabo un proyecto de investigación en el marco de la Electiva Disciplinar V del programa de Química de la UPTC, con la participación de los estudiantes de pregrado mencionados.* En este estudio, se logró la síntesis del bencenosulfonato de 4-metil-2-oxo-2*H*-cromen-7-ilo **3** con un rendimiento del 67% mediante una reacción de *O*-sulfonilación de la 7-hidroxi-4-metil-2*H*-cromen-2-ona **1** con el cloruro de bencenosulfonilo **2** en presencia de un ligero exceso de trietilamina en diclorometano a temperatura ambiente durante 1 hora (Esquema 1).



Esquema 1. Síntesis del bencenosulfonato de 4-metil-2-oxo-2*H*-cromen-7-ilo **3**.

La caracterización estructural del compuesto **3** se realizó mediante espectroscopia de IR, RMN y UV–Vis, espectrometría de masas y difracción de rayos-X de monocristal. En el espectro de IR, se observó la ausencia de la vibración de tensión O-H, mientras que las vibraciones de tensión asimétrica y simétrica del grupo SO_2 se detectaron a 1365 y 1192 cm^{-1}, respectivamente. Los espectros de RMN ^{1}H y ^{13}C mostraron la presencia de ocho señales que integran para doce protones y catorce señales de carbono, respectivamente. Además, el análisis de difracción de rayos-X confirmó que el compuesto **3** cristaliza en el grupo ortorrómbico *Pbcn*, con celda unidad a=23.319 Å, b=9.0865 Å, c=13.7280 Å, α=β=γ=90º, con una estructura cristalina dominada por interacciones intermoleculares tipo C-H···O. Este protocolo se destaca por su simplicidad operacional y un tiempo de reacción corto.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Referencias

[1] F. Annunziata, C. Pinna, S. Dallavalle, L. Tamborini, A. Pinto. *Int. J. Mol. Sci.* **2020**, *21*, 4618, doi: 10.3390/ijms21134618.

[2] A. Salinas-Torres, E. Jiménez, D. Becerra, J. J. Martínez, H. Rojas, J.-C. Castillo, M. A. Macías. *J. Mol. Struct.* **2023**, *1274*, 134414, doi: 10.1016/j.molstruc.2022.134414.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-187-P ***SÍNTESIS DE 1-(4-BROMOFENIL)-5-(2,5-DIMETIL-1H-PIRROL-1-IL)-3-METIL-1H-PIRAZOL: ANÁLISIS ESPECTROSCÓPICO, TÉRMICO Y CRISTALOGRÁFICO***

Síntesis de 1-(4-bromofenil)-5-(2,5-dimetil-1*H*-pirrol-1-il)-3-metil-1*H*-pirazol: Análisis espectroscópico, térmico y cristalográfico

Erika P. Moreno [a], **Rafael R. Avila** [a], **Karen D. Sánchez** [a], **Mario A. Macias** [b], **Juan C. Castillo** [a,*]

[a] *Electiva Disciplinar V, Escuela de Ciencias Químicas, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Colombia*

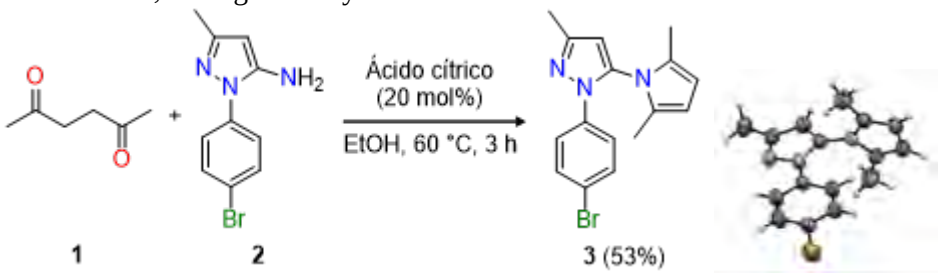
[b] *Grupo de Cristalografía y Química de Materiales, Departamento de Química, Universidad de los Andes, Colombia*

* *Autor de correspondencia: juan.castillo06@uptc.edu.co*

Palabras Claves: Reacción Paal-Knorr; pirrol; 5-aminopirazol; catálisis homogénea; ácido cítrico

Los pirroles y los pirazoles son compuestos *N*-heterocíclicos que se encuentran en productos naturales, biomoléculas esenciales y compuestos sintéticos, los cuales tienen diversas actividades biológicas, tales como antibacterial, antifúngica, anticancerígena, antioxidante, anti-inflamatoria, analgésica, entre otras [1]. Su estructura química les confiere un potencial terapéutico significativo, lo cual los convierte en *N*-heterociclos de gran interés en la química medicinal y el diseño de fármacos [1]. En particular, la síntesis del anillo pirrol se logra mediante la reacción de Paal-Knorr, la cual involucra la condensación de una 1,4-dicetona con una amina primaria utilizando catalizadores homogéneos y heterogéneos con sitios ácidos tipo Brønsted [2]. A pesar de su importancia, se han realizado pocas investigaciones sobre el uso de 5-aminopirazoles como aminas primarias en la reacción de Paal-Knorr. *Para abordar este desafío, se llevó a cabo un proyecto de investigación en el marco de la Electiva Disciplinar V del programa de Química de la UPTC, con la participación de los estudiantes de pregrado mencionados.*

En este estudio, se realizó la síntesis del híbrido pirrol-pirazol **3** con un rendimiento del 53% mediante una reacción de Paal-Knorr entre la 2,5-hexanodiona **1** y el 5-aminopirazol **2** en presencia de etanol y ácido cítrico como catalizador (20 mol%) a una temperatura de 60 °C durante 3 horas (Esquema 1). Se logró la caracterización estructural del híbrido **3** mediante espectroscopia de IR, RMN y UV-Vis, espectrometría de masas, análisis termogravimétrico y calorimetría diferencial de barrido. El análisis de difracción de rayos-X reveló que el híbrido **3** cristaliza en el grupo espacial triclínico *P*-1, con celda unidad a=7.80725Å, b=9.8003 Å, c=10.79002Å, α=72.964º, β=85.0837º y γ=74.4476º, con una estructura cristalina dominada por interacciones intermoleculares tipo C-H···N y C-H···Br. Además, el espectro de RMN ^{1}H mostró un singulete a 5.90 ppm correspondiente a dos protones del anillo pirrólico y un singulete a 6.22 ppm correspondiente al protón del anillo pirazólico. Este protocolo se destaca por su tiempo de reacción corto y el uso de un disolvente eco-compatible y un catalizador no tóxico, biodegradable y económico.



Esquema 1. Síntesis del híbrido **3** mediante una reacción Paal-Knorr catalizada por ácido cítrico.

Referencias

[1] Becerra, D.; Abonia, R.; Castillo, J.-C. *Molecules* **2022**, *27*, 4723, doi: 10.3390/molecules27154723.

[2] Shi, T.; Yin, G.; Wang, X.; Xiong, Y.; Peng, Y.; Li, S.; Zeng, Y.; Wang, Z. *Green Synth. Catal.* **2023**, *4*, 20-34, doi: 10.1016/j.gresc.2022.06.004.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-188-P ***ESTUDIOS DE NUEVOS PIGMENTOS ELECTROACTIVOS OBTENIDOS MEDIANTE SÍNTESIS CONVERGENTE, PARA SU APLICACIÓN EN CELDAS SOLARES SENSIBILIZADAS POR PIGMENTOS (DSSCS).***

Estudios de Nuevos Pigmentos Electroactivos Obtenidos Mediante Síntesis Convergente, para su Aplicación en Celdas Solares Sensibilizadas por Pigmentos (DSSCs).

Colleen Guzmán[a*], Isabel Seoneray[a], Alejandro Ortiz[a]

[a] *Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos, Universidad del Valle, Colombia.*
**Colleen Guzmán Lorza: colleen.guzman@correounivalle.edu.co*

Palabras Claves: triarilaminas; carbazol; dador- π-aceptor; fotovoltaica; celdas solares sensibilizadas por pigmentos (DSSCs).

El agotamiento de los combustibles fósiles y el gran impacto ambiental asociado a su combustión, han impulsado el desarrollo de tecnologías de producción de energía basadas en fuentes de energía limpias y renovables. En este contexto, la implementación de energía solar fotovoltaica ha recibido una gran atención en los últimos años debido a su prometedor potencial. En el presente trabajo se plantea la obtención de colorantes orgánicos electro-atractivos del tipo dador-π-aceptor, donde las unidades donadoras serán triarilaminas y carbazol, se utilizarán anillos de benceno y grupos vinílicos como espaciador p-conjugado y como unidad aceptora ácido cianoacrílico. La síntesis de estas moléculas asimétricas se llevará a cabo mediante una metodología sintética convergente (Figura 1), donde se realizarán reacciones de acoplamiento cruzado de Suzuki y Miyaura, condensación de Knoevenagel y condensación aldólica cruzada como ruta sintética para la obtención de la moléculas objetivo. Posteriormente, se evaluarán las propiedades ópticas, electroquímicas y de transporte de carga de los compuestos objetivo para establecer su potencial aplicación en celdas solares sensibilizadas por pigmentos (DSSCs).

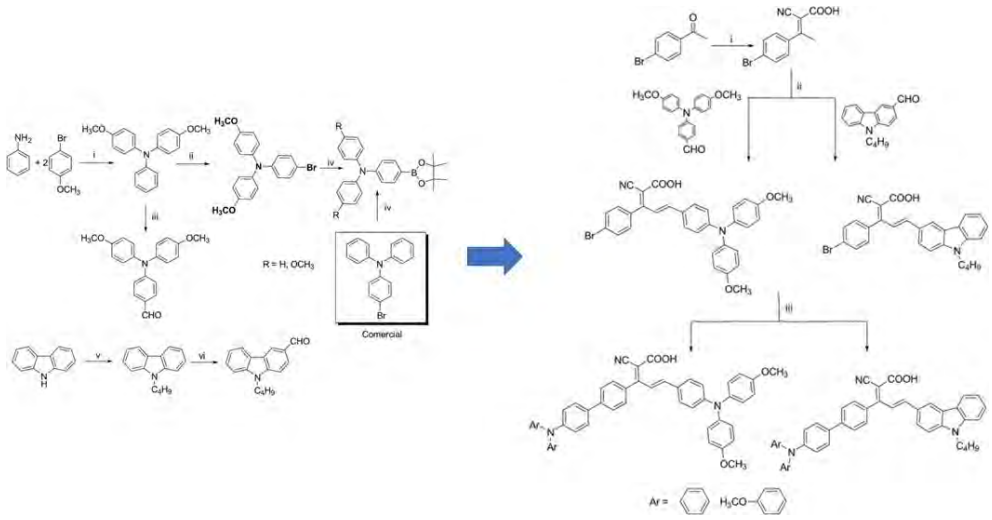


Figura 1. Ruta de síntesis de las moléculas objetivo.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Uso Potencial de Sales de Vinil Sulfonio en la Síntesis de γ-Lactamas α-γ-Disustituidas.

Catalina Hoyos[a], Jhon Zapata Rivera[b], Diego Gamba Sánchez*
Departamento de química, Universidad de los Andes, Bogotá Colombia
**da.gamba1361@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: γ-lactamas α,γ disustituidas; sales de vinilsulfonio.

Las γ-lactamas α,γ-disustituidas se pueden formar a través de reacciones de transamidación, reordenamientos, hydrogenación, amidación, entre otros. Sin embargo, estas estrategias implican varios pasos de síntesis o el uso de catalizadores metálicos. Por esta razón que existe un interés por estudiar nuevas metodologías para producir dicho núcleo de amidas α,γ-disustituidas cíclicas, que en este casa trata de emplear sales de vinil sulfonio. A la fecha no se conoce una estrategia que transcurra usando estos reactivos. Por lo tanto, en este trabajo se propuso estudiar la síntesis de γ-lactamas α,γ-disustituidas empleando sales de vinil sulfónio como precursores y ácidos hidroxámicos, imidas o carbamatos. El proceso inicia con la adición del nucleófilo nitrogenado sobre la sal de vinil sulfonio, para posteriormente darse una ciclación intramolecular. Lo anterior fue inspirado en el artículo de Xie y colaboradores del 2010, que permitió propone una nueva estrategia para la preparación de amidas α,γ-disustituidas empleando sales de vinil sulfonio, y como nucleófilos oxo amidas (figura 1).

En este trabajo se detallan diversas aproximaciones para obtener el producto cíclico. Así como el análisis de los inconvenientes y las propuestas que se han tenido para lograr llegar a la molécula objetivo.

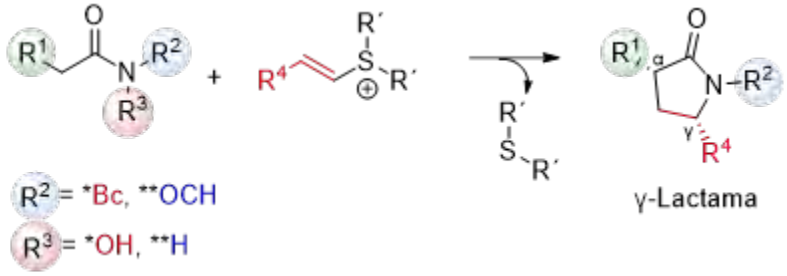


Figura 1. Esquema general para la síntesis de γ-lactamas α,γ-disustituidas (R^2 y R^3 *ácidos hidroxámicos, **formilcinamamidas)

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Síntesis de *N*-(Arilaminometil)-ftalimidas en Ausencia de Disolvente

Andrea C. Barrera [a,b], **Lina V. Pinzón** [a,b], **Erika Moreno** [a], **Diana K. Becerra** [a,*], **Juan C. Castillo** [b,*]

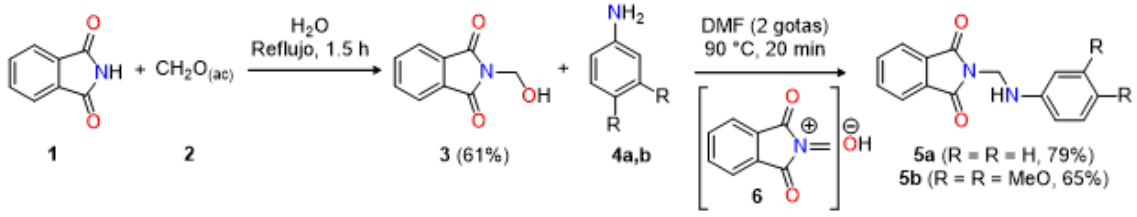
[a] *Electiva Disciplinar IV-Compuestos Heterocíclicos, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Colombia*
[b] *Electiva Disciplinar V-Espectrometría de masas, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Colombia*

Autores de correspondencia: juan.castillo06@uptc.edu.co, diana.becerra08@uptc.edu.co

Palabras Claves: *N*-(Hidroximetil)-ftalimida; arilaminas; *N*-(arilaminometil)-ftalimida; *N*-acilimonio

Las ftalimidas *N*-sustituidas tienen una gran relevancia en la química medicinal debido a su amplio espectro de actividades biológicas, abarcando propiedades antimicrobianas, antifúngicas, antiinflamatorias, antihelmínticas, antivirales, antituberculosas, anticonvulsivas y antitumorales [1,2]. Estos compuestos poseen una alta versatilidad y pueden servir como bloques de construcción en la síntesis de otros compuestos de interés sintético y farmacológico. En particular, la síntesis de *N*-(arilaminometil)-ftalimidas **5** mediante una reacción de tipo Mannich entre ftalimida, formaldehído y arilamina ha sido poco explorada [3]. Por lo tanto, ha surgido la necesidad de desarrollar una estrategia de síntesis eficiente y eco-compatible para obtener nuevas *N*-(arilaminometil)-ftalimidas **5**. *Para abordar este desafío, se llevó a cabo un proyecto de investigación en el marco de las Electivas Disciplinares IV y V del programa de Química de la UPTC con la participación de los estudiantes de pregrado mencionados.*

Inicialmente, se logró obtener la *N*-(hidroximetil)-ftalimida **3** con un rendimiento del 61% mediante una reacción entre la ftalimida **1** y una solución de formaldehído **2** en agua, utilizando reflujo durante 1.5 h (Esquema 1). Posteriormente, se procedió a la síntesis de las *N*-(arilaminometil)-ftalimidas **5a,b** mediante una reacción entre *N*-(hidroximetil)-ftalimida **3** y las arilaminas **4a,b** en presencia de 2 gotas de DMF, calentando la mezcla a 90 °C durante 20 min. Los crudos de reacción se purificaron mediante cromatografía en columna usando diclorometano como fase móvil, lo que permitió obtener las *N*-(arilaminometil)-ftalimidas **5a** y **5b** con rendimientos del 79% y 65%, respectivamente. El proceso de formación de la *N*-(arilaminometil)-ftalimida **5** implicaría la adición nucleofílica del grupo –NH_2 de la arilamina al ión *N*-aciliminio **6**, el cual se generaría *in situ* a partir de la *N*-(hidroximetil)-ftalimida **3**. Las *N*-(arilaminometil)-ftalimidas **5a** y **5b** fueron caracterizados mediante espectroscopía de IR, UV–Vis, RMN y espectrometría de masas. En resumen, el protocolo sintético se destaca por su simplicidad operacional, tiempos de reacción cortos y rendimientos aceptables.



Esquema 1. Síntesis de *N*-(arilaminometil)-ftalimidas **5** en ausencia de disolvente.

[1] G. Roman. Eur. J. Med. Chem. 2015, 89, 743–1816.
[2] E.M. Afsah, E.M. Kandil, S.M. Abdelmageed, F.T. Elbarhmtoushi. J. Heterocycl. Chem. 2018, 57, 346–354.
[3] V.L. M. Sena, R.M. Srivastava, C.A.D. Simone, S.M.D.C. Goncalves, R.O. Silva, M.A. Pereira. J. Braz. Chem. Soc. 2007, 18, 1224–1234.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-192-P ***SÍNTESIS DE PIGMENTOS ELECTROACTIVOS PARA SU APLICACIÓN EN CELDAS SOLARES SENSIBILIZADAS POR PIGMENTOS DSSCS A PARTIR DE ACETOFENONA.***

Síntesis de pigmentos electroactivos para su aplicación en celdas solares sensibilizadas por pigmentos DSSCs a partir de acetofenona

Isabella Rios M*[a], Isabel Soneray[a], Alejandro Ortiz[a].

Departamento de Química, Universidad del Valle, Colombia.

*[1] isabella.rios@correounivalle.edu.co.

Palabras Claves: Celdas solares sensibilizadas por pigmentos (DSSC), carbazol, trifenilamina, acoplamiento de Buchwald – Hartwig , condesacion aldolica.

RESUMEN

Las celdas solares sensibilizadas por pigmentos (DSSC); han estado en auge en los ultimos años, debido a su gran potencial, sus materiales son más baratos y su producción más simple[1], en este tipo de celdas el pigmento sensibilizador juega un papel clave al absorber luz solar y convertir la energía solar en eléctrica, hay cinco materiales que componen una DSSC, un material mesoporoso, este transporta los electrones, un material transparente conductor, el cual se deposita sobre un sustrato, puede ser un vidrio o un polímero flexible y transparente formando así un sustrato conductor transparente, un pigmento que actúa como fotosintetizador, un electrolito que actúa como transportador de agujeros y un material conductor depositado sobre un segundo sustrato conductor transparente que permite cerrar el ciclo de conducción, llamado contra electrodo[2]. Los pigmentos orgánicos libres de metales son moléculas orgánicas con estructuras generalmente del tipo Push – Pull, tambien conocidos como Donor -□- Aceptor (D-π-A), teniendo coeficientes de absorción molar altos gracias a la transferencia de carga intramolecular y a sus transiciones intramoleculares[3] π-π*. Por lo anterior, en este trabajo se presenta la síntesis de unidades dadores (el carbazol y la trifenilamina) por medio de condesacion aldolica y acoplamiento de Buchwald – Hartwig. Con el fin de estudiar el efecto de la conjugación π extendida y la capacidad donadora sobre las propiedades optoelectrónicas y electroquímicas (Figura 1).

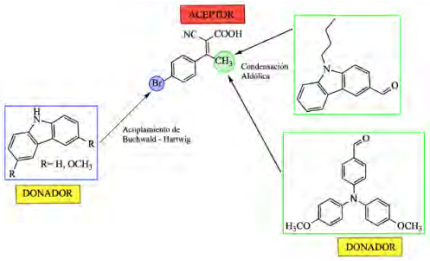


Figura 1. Estructura de las moleculas propuestas.

REFERENCIAS

1. Halme, J.; (**2002**). *Master Thesis*, Helsinki University of Technology, Finland.
2. Kalyanasundaram, K. (**2010**). *Dye-sensitized Solar Cells* (1st ed.). EPFL Press. https://doi.org/10.1201/b16409.
3. Bamfield, P. (**2010**). Phenomena Involving Absorption of Light and Energy Transfer. In Chromic Phenomena: Technological Applications of Colour Chemistry; *R. Soc. Chem.*; pp. 366–470.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-239-P ***SÍNTESIS "ONE-POT" DE 3-BENZOIL-4-ESTIRIL-2-METILQUINOLINAS Y SU TRANSFORMACIÓN EN NUEVOS HÍBRIDOS MOLECULARES (E)-2-(3-BENZOIL-4-ESTIRILQUINOLIN-2-IL)-3-FENILQUINAZOLIN-4(3H)-ONA***

Síntesis "*one-pot*" de 3-benzoil-4-estiril-2-metilquinolinas y su transformación en nuevos híbridos moleculares (*E*)-2-(3-benzoil-4-estirilquinolin-2-il)-3-fenilquinazolin-4(3*H*)-ona

Diana Vera Alarcón[a], Diana M. Ardila[a], Geraldine Alvarez[a], Juan G. Bernal[a], Alirio Palma[a,*] Justo Cobo[b].

[a]*Laboratorio de Síntesis Orgánica, Escuela de Química, Universidad Industrial Santander, Bucaramanga, Colombia.*
[b]*Departamento de Química Inorgánica y Orgánica, Universidad de Jaén, España.*
[*]*e-mail:* apalma@uis.edu.co

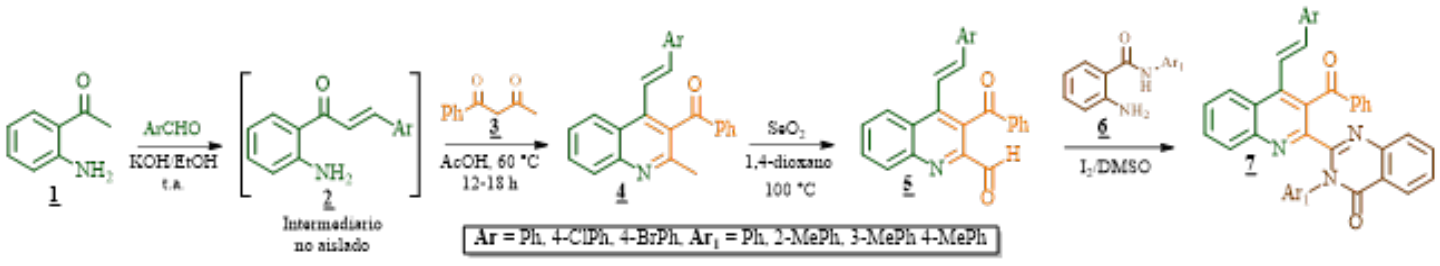
Palabras Claves: Quinolina; quinazolinona; híbridos moleculares; ciclocondensación.

INTRODUCCIÓN

Los sistemas heterocíclicos de la quinolina y la quinazolin-4-ona han sido ampliamente estudiados debido a la gran variedad de manifestaciones biológicas que exhiben muchos de sus derivados.[1–4] En este contexto y basados en la rica experiencia del LSO de la UIS en la preparación de 4-estirilquinolinas,[5] en este trabajo se describe una ruta de síntesis sencilla y efectiva para acceder a nuevos híbridos moleculares estirilquinolina-quinazolin-4-ona, utilizando como precursores estratégicos las 3-benzoil-4-estiril-2-metilquinolinas, que, a su vez, fueron preparadas mediante una metodología "*one-pot*" de dos pasos.

METODOLOGÍA

La construcción de los nuevos híbridos moleculares **7** se llevó a cabo siguiendo la secuencia de transformaciones químicas que se muestran en el ***Esquema 1***. Inicialmente se prepararon las 3-benzoil-2-metil-4-estirilquinolinas **4** mediante una metodología "*one-pot*" de dos pasos que involucra, en primer lugar, la condensación de *Claisen-Schmidt* entre la 2´-aminoacetofenona **1** y diferentes aldehídos aromáticos que deriva en la formación de las correspondientes 2´-aminochalconas **2**, intermediarios no aislados que in situ reaccionan con la benzoilacetona **3** en ácido acético para dar, en el segundo paso, el producto de *Friedländer* **4**.[5] Posteriormente, las 2-metilquinolinas **4** fueron transformadas eficientemente en los correspondientes 2-formilderivados **5** por reacción con SeO_2. Finalmente, los 2-formilderivados **5** se sometieron a un proceso de condensación-ciclación intramolecular oxidativa con las 2-amino-*N*-arilbenzamidas **6** en DMSO y yodo molecular, obteniéndose así los híbridos moleculares de interés **7** con altos rendimientos de reacción. A través de esta metodología alterna, se logró la construcción de 12 híbridos moleculares nuevos **7**, para los cuales, por primera vez, se reportan sus propiedades físicas y espectroscópicas.



Esquema 1. Síntesis de los nuevos híbridos (*E*)-2-(3-benzoil-4-estirilquinolin-2-il)-3-fenilquinazolin-4(3*H*)-ona **7**.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

CONCLUSIONES

La metodología aquí descrita permite acceder, bajo un proceso "*one-pot*", a las 3-benzoil-4-estiril-2-metilquinolinas **3**, que actúan como precursores estratégicos de los nuevos híbridos moleculares estirilquinolina-quinazolin-4-ona **7**, usando reacciones clásicas de oxidación y de condensación-ciclación intramolecular oxidativa.

BIBLIOGRAFÍA

1. Musiol, R. Med Chem. 16(2), 141–154 (2020).
2. Kumar, S., Bawa, S. & Gupta, H. Mini Rev. Med. Chem. 9(14), 1648–1654 (2009).
3. Chaya, P. et al. J. Mol. Chem. 22(1), 338–379 (2022).
4. Rajput, R. & Mishra, A. P. Int. J. Pharm. Pharm. Sci. 4(2), 66–70 (2012).
5. Palma, A. et al. Synthesis. 52(12), 1804–1822 (2020).

AGRADECIMIENTOS: Este trabajo fue financiado por la vicerrectoría de Investigación y Extensión de la UIS, proyecto 3918.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-306-P ***OBTENCIÓN DE ANÁLOGOS DEL DERIVADO DIBENZOTIOFENOIMIDAZOL-UBMC COMO POTENCIALES MOLÉCULAS ANTI-LEISHMANIASIS MEDIANTE REACCIÓN DE SUZUKI-MIYAURA.***

Obtención De Análogos Del Derivado Dibenzotiofenoimidazol-UBMC Como Potenciales Moléculas Anti-Leishmaniasis Mediante Reacción De Suzuki-Miyaura.

Andrés Camilo Triana [a], Rubén Varela [b], Edwin Flórez [b], Kriss D Pantoja [c]*

[a] *Grupo de Investigación en Electroquímica y Medio Ambiente, Universidad Santiago de Cali, Cali, Colombia*
[b] *Grupo de Investigación en Química y Biotecnología, Universidad Santiago de Cali, Cali, Colombia*
[c] *Departamento de Ciencias Farmacéuticas y Químicas, Universidad Icesi, Cali, Colombia*
** Autor de correspondencia: kriss.pantoja@u.icesi.edu.co*

Palabras Claves: Leishmaniasis; acoplamiento Suzuki-Miyaura; irradiación por microondas; imidazole; carbenos *N*-heterocíclicos.

Según la OMS alrededor de un billón de personas son afectadas por una o dos enfermedades tropicales desatendidas en 149 países, de las cuales pueden ser: malaria, chagas, leishmaniasis, lepra, dengue, zika, chikunguña, tripanosomiasis entre otras. La leishmaniasis es una enfermedad tropical propagada y mantenida por un ciclo de vida complejo entre el protozoo del parasito del género de *Leishmania spp*, vectores moscos y mamíferos anfitriones. Un blanco terapéutico es la obtención de inhibidores de la proteína AKT. Varela-Miranda y colaboradores, obtuvieron por docking molecular dos compuestos **UBMC1** y **UBMC2** (estructuras bajo patente), que se unen al dominio de pleckstrina bloqueando la fosforilación de AKT y dando paso a la apoptosis celular. El trabajo realizado por Varela-Miranda y colaboradores, demuestra que la inhibición de AKT está asociada a la muerte del parasito por apoptosis. Debido a esto, se decidió realizar la síntesis de análogos de **UBMC1** y **UBMC2** por medio de la reacción de acoplamiento de Suzuki-Miyaura (S-M), buscando una metodología versátil, rápida y eficiente para la obtención de nuevos compuestos con el sistema dibenzofenilimidazol, con potencial antileishmaniasis.

En este trabajo, se emplearon condiciones típicas de reacción de S-M. La reacción de acoplamiento se planteó partiendo de 4,5-dibromo-2-fenil-1*H*-imidazol (**1**) y el ácido dibenzo[*b*,*d*]tiofen-3-ilborónico (**2**) en un medio básico como K_2CO_3 y dicloruro de bis(trifenilfosfina)paladio (II) como catalizador, evaluando diferentes metodologías convencionales y no convencionales como calentamiento convencional a reflujo, microondas y ultrasonido, así mismo, se comparó la eficiencia de los disolventes dioxano y THF, con el fin de optimizar la síntesis teniendo en cuenta tiempo y rendimientos de reacción. La caracterización espectroscópica se realizó con espectrometría de masas, infrarrojo y resonancia magnética nuclear mono y bidimensional. De esta manera se logró establecer las mejores condiciones para la obtención de los análogos 4,5-bis(dibenzo[*b*,*d*]tiofen-2-il)-2-fenil-1*H*-imidazol (**4**) y el 1,4,5-tris(dibenzo[*b*,*d*]tiofen-2-il)-2-fenil-1*H*-imidazol (**6**). El grupo imidazol demostró una alta reactividad al generar el acoplamiento de los 3 grupos dibenzo[*b*,*d*]tiofeno, esto debido a la arilación del grupo dibenzo[*b*,*d*]tiofeno y su posibilidad de formar *N*-Carbenos.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-352-P ***SÍNTESIS VERDE Y CARACTERIZACIÓN VIBRACIONAL DE LA 2,3-DIFENIL-2,3-DIHIDROQUINAZOLIN-4(1H)-ONA***

Síntesis verde y caracterización vibracional de la 2,3-difenil-2,3-dihidroquinazolin-4(1*H*)-ona

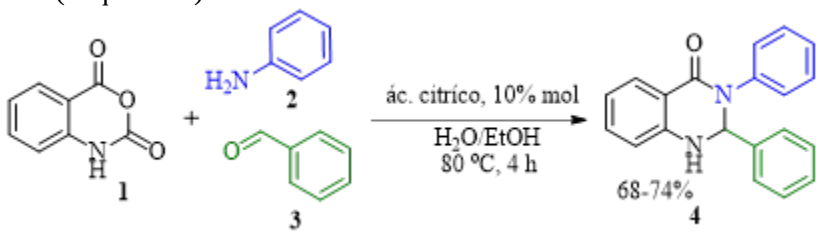
Nicole D. Ortiz* [a], **Juan M. Urbina** [a], **Vladimir V. Kouznetsov** [a], **Enrique Mejía** [b], **Leonardo Muñoz** [b]

[a] *Laboratorio de Química Orgánica y Biomolecular-LQOBio, Universidad Industrial de Santander, Colombia*
[b] *Laboratorio de Espectroscopía Atómica y Molecular-LEAM, Universidad Industrial de Santander , Colombia*
** Autor de correspondencia: nicole2183081@correo.uis.edu.co*

Palabras Claves: Síntesis verde; 2,3-Dihidroquinazolin-4(1*H*)-onas; Análisis vibracional; DFT.

Las 2,3-dihidroquinazolin-4(1*H*)-onas son sustancias ampliamente utilizadas en la síntesis de fármacos debido a que presentan múltiples actividades, p. ej., antibacteriana, antifúngica, antitumoral, anticancerígena, etc.; también hacen parte de muchos productos farmacéuticos, agroquímicos, veterinarios, entre otros. Además, estas moléculas son fácilmente oxidables a sus análogos, las quinazolin-4(3*H*)-onas, los cuales también son importantes núcleos heterocíclicos biológicamente activos[1]. Estas razones hacen de las 2,3-dihidroquinazolin-4(1*H*)-onas moléculas de gran interés en el campo de la química orgánica y la química médica.

Durante los últimos años, el LQOBio ha realizado reportes de esta síntesis mediante una reacción multicomponente con el fin de evaluar su actividad antiviral frente al virus del Zika. Teniendo en cuenta lo mencionado anteriormente, se optimizó la síntesis de la 2,3-difenil-2,3-dihidroquinazolin-4(1*H*)-ona **4**, preparada mediante una condensación de tres componentes, utilizando anhídrido isatóico **1**, anilina **2** y benzaldehído **3**, empleando una mezcla 1:1 de agua/etanol como disolvente y ácido cítrico hidratado (10% mol) como catalizador. Una vez finalizada la reacción, se evaporó el etanol para favorecer la cristalización del producto, se filtró y se secó para finalmente obtener **4** como un sólido blanco con rendimiento entre el 68-74% (Esquema 1).



Esquema 1. Síntesis multicomponente de la 2,3-difenil-2,3-dihidroquinazolin-4(1*H*)-ona **4** en condiciones amigables.

Finalmente, se llevó a cabo la caracterización vibracional del producto obtenido **4**, en colaboración con el LEAM, mediante cálculos *ab initio* empleando GAMESS utilizando el nivel de teoría B3LYP/6-311+G (d,p), para comparar los datos calculados con los obtenidos de las espectroscopias infrarrojo (FT-IR) y RAMAN.
La comparación de las señales calculadas *vs.* observadas permitió la identificación inequívoca de las bandas principales en los espectros.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Bibliografía

(1) Salehi, P.; Dabiri, M.; Zolfigol, M. A.; Baghbanzadeh, M. A Novel Method for the One-Pot Three-Component Synthesis of 2,3-Dihydroquinazolin-4(1H)-Ones. Synlett 2005, 2005 (07), 1155–1157. https://doi.org/10.1055/s-2005-865200.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-390-P ***SÍNTESIS DE DERIVADOS 2-(ARILILIDENEAMINO)-3-(1H-INDOL-3-IL)-2,3-DIHIDRO-1H-ISOINDOL-1-ONA***

Síntesis de Derivados 2-(arililideneamino)-3-(*1H*-indol-3-il)-2,3-dihidro-1*H*-isoindol-1-ona

Ricaurte Rodríguez[a*], **Luis H. Moreno**[b]

[a] Grupo de Investigación en Química Heterocíclica, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Departamento de Química
[b] Grupo de Investigación en Química Heterocíclica, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Departamento de Farmacia
*Autor de correspondencia: rrodrigueza@unal.edu.co

Palabras Claves: Derivados de indoles; ácido 2-formilbenzoico; hidrazina, hidrazida; hidrazonas; potenciales antibióticos.

En el siguiente trabajo se reportaran las condiciones para la síntesis de derivados de 2-(arililideneamino)-3-(*1H*-indol-3-il)isoindolin-1-ona, a partir de la nueva 2-amino-3-(1*H*-indol-3-il)-2,3-dihidro-1*H*-isoindol-1-ona con diferentes aldehídos, tanto aromáticos como heteroaromáaticos. La secuencia de síntesis inicia con la obtención del derivado indólico **3**, el cual luego se hace reaccionar en condiciones suaves con hidrato de hidrazina para formar el derivado de hidrazida **4**; por último, el compuesto **4** reacciona con diferentes aldehídos, a temperatura ambiente y en presencia de ácido acético como catalizador, para dar los compuestos tipo 5, las que son las hidrazonas objetivo de esta investigación (Figura 1). Se espera que las nuevas moléculas sintetizadas pueden tener alguna actividad biológica como lo son antimicrobiana, actividad anticancerígena, o actividad antiepiléptica: Los compuestos presentados fueron caracterizados por Resonancia Magnética Nuclear protónica, de carbono y en algunos casos haciendo uso de experimentos bidimensionales que nos permitieron establecer las estructuras de los nuevos compuestos de forma inequívoca.

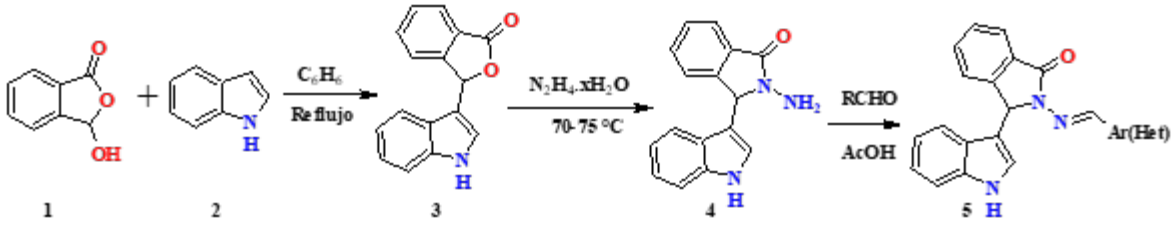


Figura 1. Secuencia sintética seguida para la obtención de las hidrazonas **5**

Se logró la síntesis de los productos finales usando metodologías y condiciones suaves de reacción con rendimientos entre moderados (40 %) y muy buenos (95 %). El siguiente paso de esta investigación es el estudio de su posible actividad biológica frente a algunos patógenos seleccionados.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-391-P ***1,3-DITIANILIZACIÓN DE ANILLOS AROMÁTICOS: SÍNTESIS DE HIDROXI Y METOXI ALDEHÍDOS PROTEGIDOS CON DITIOACETALES Y SU DESPROTECCIÓN CON (COCL)_2***

1,3-Ditianilización de Anillos Aromáticos: Síntesis de Hidroxi y Metoxi Aldehídos Protegidos con Ditioacetales y su Desprotección con $(COCl)_2$

Gabriel **Hernández-Abdallah** [a], **Julia M. Urbiña** [a], **Camilo Mahecha-Mahecha** [a],

Diego A. Gamba-Sánchez [a]*

a. *Laboratorio de Síntesis Orgánica, Bio y Organocatálisis, Universidad de los Andes, Colombia*

** Autor de correspondencia: da.gamba1361@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: Formilación; Anillos aromáticos activados; Desprotección; Ditioacetales.

Las reacciones de formilación de compuestos aromáticos implican un agente formilante electrofílico que reacciona con un anillo aromático activado. Este tipo de reactividad se ve en gran variedad de reacciones, como la reacción de Gatterman, Gatterman-Koch, y Vilsmeier-Haack, las cuales involucran cloruros de imidoilo, cloruros de formilo y sales de cloroiminio como agentes formilantes respectivamente[1]. Estos grupos formilo formados pueden ser vulnerables a ataques nucleofílicos, por lo que, una estrategia sintética para evitar reacciones indeseadas sobre estos grupos es el uso de grupos protectores, como el empleo de dioles y ditioles para la formación de acetales y ditioacetales[2]. Estudios previos del grupo de investigación sobre la química de los sulfóxidos y la cloración de anillos aromáticos[3], encontraron que el 1,3-ditiano-1-óxido presentaba actividad como electrófilo para reacciones de sustitución electrofílica aromática, lo que llevó a la exploración de su uso como agente formilante. Con este trabajo se busca desarrollar una nueva reacción de formilación utilizando ese sulfóxido, junto con $(COCl)_2$, para posicionar grupos formilo protegidos con un ditioacetal sobre el anillo aromático (Figura 1A). La especie reactiva, se forma a partir de la reacción del 1,3-ditiano-1-óxido con $(COCl)_2$ en condiciones anhidras. Estas condiciones de reacción se optimizaron utilizando el 2-naftol como sustrato modelo. Por lo general, se ha encontrado que los sustratos con anillos aromáticos activados, principalmente con sustituyentes CH_3O- y HO-, conducen al producto formilado protegido, en forma de ditioacetal. Sin embargo, a mayores tiempos de reacción, se observaba algo del aldehído desprotegido. A partir de esto, se quiso evaluar la capacidad del $(COCl)_2$ como agente desprotector de carbonilos protegidos con ditioacetales (Figura 1B), donde se busca optimizar las condiciones de reacción, como la temperatura y equivalentes de $(COCl)_2$.

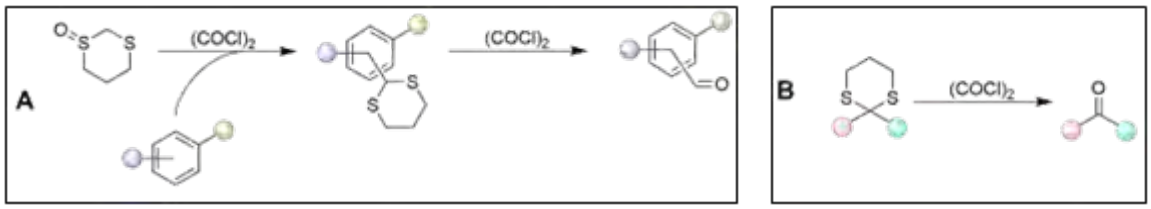


Figura 1: Esquema de reacción general para (A) la 1,3-ditianilización de compuestos aromáticos activados y su posterior desprotección del aldehído enmascarado con $(COCl)_2$; y (B) la desprotección con $(COCl)_2$ de compuestos carbonílicos protegidos con 1,3-propanoditiol.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-423-P ***UNA ESTRATEGIA SINTÉTICA LIBRE DE GRUPOS PROTECTORES PARA LA PREPARACIÓN DE ALNUSTONAS Y SU EVALUACIÓN EN DOS LÍNEAS CELULARES DE CÁNCER.***

Una Estrategia Sintética Libre de Grupos Protectores para la Preparación de Alnustonas y su Evaluación en Dos Líneas Celulares de Cáncer.

Santiago Álvarez[a], Diego Pulgarin[b], Laura Mira[b], Neil Vasquez[b], Edwin Patiño[c], Felipe Otálvaro[a]*

[a] Síntesis y Biosíntesis de Metabolitos Naturales, Universidad de Antioquia, Colombia
[b] Grupo de Investigación de Biotecnología Animal, Universidad Nacional de Colombia sede Medellín.
[c]Grupo de Bioquímica Estructural de Macromoléculas, Universidad de Antioquia
** Autor de correspondencia: leon.otalvaro@udea.edu.co*

Palabras Claves: Diarilheptanoides, Cicloadición 1,3 dipolar, Ensayo MTT.

Las alnustonas, diarilheptanoides aislados de plantas del género Alnus (Betulaceae), representan un grupo de compuestos prometedores como inhibidores de la proliferación de células de cáncer de mama por su presunta interacción con el receptor de estrógeno ER-a y actividades antiproliferativas en el rango de micro-nano molar. Las síntesis reportadas para estos compuestos emplean como estrategia central la condensación aldólica en equilibrio ó acoplamientos tipo Wittig con rendimientos bajos e instalación obligatoria de grupos protectores. En este trabajo, una nueva estrategia sintética libre de grupos protectores y centrada en la cicloadición 1,3-dipolar es presentada como alternativa para la generación del miembro más activo hasta ahora reportado de las alnustonas. Adicionalmente, la actividad antiproliferativa de dicho compuesto y un análogo particularmente accesible es evaluada en dos líneas celulares de cáncer, mediante el ensayo MTT.

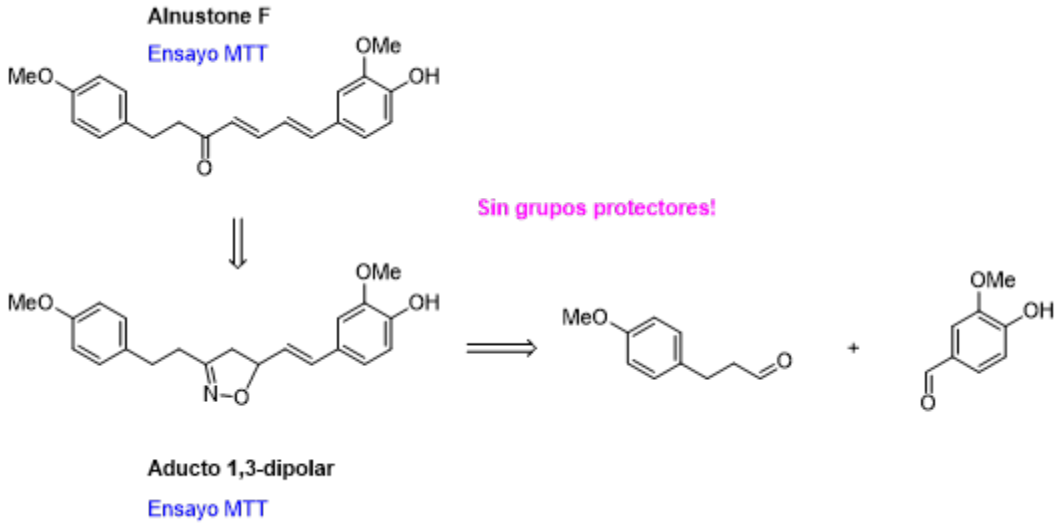


Figura 1: Plan sintético para la obtención de alnustona F.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-424-P ***CONVERSIÓN DE 3-FORMAIL- A 3-HIDROXIPIRAZOLO[1,5-A]PIRIMIDINAS VIA DESCARBOXILACIÓN OXIDATIVA: ESTUDIO FOTOFÍSICO Y DETECCIÓN DE METALES.***

Conversión de 3-Formail- a 3-HidroxiPirazolo[1,5-*a*]pirimidinas via Descarboxilación Oxidativa: Estudio Fotofísico y Detección de Metales

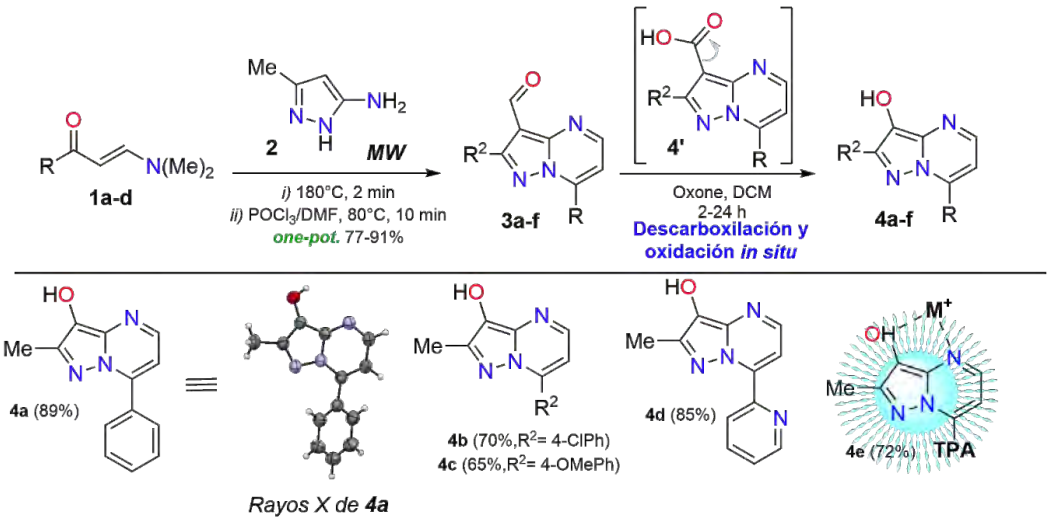
Marianna Cubides [a,*] **Carlos Cifuentes** [a], **Jaime Portilla** [a]

[a] *Grupo de Investigación en Compuestos Bio-orgánicos (GICOBIORG), Departamento de Química, Universidad de los Andes, Carrera 1 No. 18A-10, Bogotá 111711, Colombia.*

* *Autor de correspondencia: m.cubidesd@uniandes.edu.co*

Palabras Clave: Descarboxilación, hidroxilación, pirazolo[1,5-*a*]pirimidina, quelación.

El anillo heteroaromático y planar de pirazolo[1,5-*a*]pirimidina (PP) posee una fusión característica 5:6 y es un componente clave de compuestos con un amplio espectro de actividades biológicas y de ciertos fluoróforos que son pertinentes en los ámbitos de la investigación fotofísica y ciencia de materiales. Sin embargo, su aplicación en con respecto a la interacción con iones metálicos (sensores o complejos de coordinación) es limitada a tan solo cinco tipos de ligandos basados en este tipo de anillo. Por lo tanto, con el objetivo de obtener nuevos ligandos mediante la funcionalización del anillo, se estudió la oxidación de 7-aril-3-formilpirazolo[1,5-*a*]pirimidinas **3** al respectivo ácido carboxílico utilizando sales de monopersulfato de potasio (Oxone®), obteniendo la 7-aril-3-hidroxipirazolo[1,5-*a*]pirimidina **4** en un resultado inesperado pero fascinante.



Este resultado inédito y la formación del ácido intermedio **4'**, describe una posible reacción de descarboxilación oxidativa sobre la posición 3 del anillo de PP, siendo el primer reporte sintético obtenido, dado que este tipo de reacciones solo se ha observado en ambientes biológicos.[3,4] Finalmente, la sustitución de los nuevos productos con grupos fluoróforos como

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

trifenilamina (TPA) posibilitan el diseño y preparación de nuevas sondas moleculares para la detección de iones metálicos según nuestros resultados preliminares con **4e**.

Bibliografía

1. Tigreros, A.; Rosero, H.-A.; Castillo, J.-C.; Portilla, J. Integrated Pyrazolo[1,5-a]Pyrimidine–Hemicyanine System as a Colorimetric and Fluorometric Chemosensor for Cyanide Recognition in Water. Talanta 2019, 196, 395–401.
2. Peña, C. A.; Design and synthesis of chemosensors based on 7-ferrocenylpyrazolo[1,5-a]pyrimidines for the detection of H+ and CN-. Tesis de Maestría, Universidad de los Andes, December 2021.
3. Pei, X.; Erixon, K. M.; Luisi, B. F.; Leeper, F. J. Structural Insights into the Prereaction State of Pyruvate Decarboxylase from Zymomonas Mobilis. Biochemistry 2010, 49 (8), 1727–1736.
4. Payne, K. A.; Marshall, S. A.; Fisher, K.; Rigby, S. E.; Cliff, M. J.; Spiess, R.; Cannas, D. M.; Larrosa, I.; Hay, S.; Leys, D. Structure and Mechanism of Pseudomonas Aeruginosa Pa0254/Huda, a Prfmn-Dependent Pyrrole-2-Carboxylic Acid Decarboxylase Linked to Virulence. ACS Catalysis 2021, 11 (5), 2865–2878.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

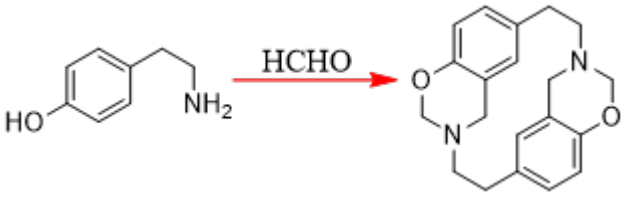
Reacción de 4-hidroxibencilamina con Formaldehído

Andres F. Gonzalez [a]*, **Rodolfo Quevedo** [b], **Jorge I. Ali** [c]

[a b c] *Universidad Nacional de Colombia*
* Autor de correspondencia: anfgonzalezon@unal.edu.co

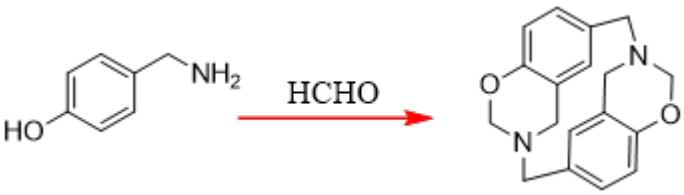
Palabras clave: 4-hidroxibencilamina, formaldehído, puentes de hidrogeno, azaciclofano.

La reacción entre 4-hidroxifeniletilaminas con formaldehído tienen como producto mayoritario moléculas de tipo azaciclofano. Se han reportado derivados macrocíclicos de tiramina y L-tirosina etil ester, cuyo macrociclo tiene 14 átomos en su cavidad (Esquema 1). En este trabajo se estudió la reacción de 4-hidroxibencilamina con formaldehido para establecer si es posible obtener azaciclofanos con menor tamaño de cavidad, ampliado así el alcance de la reacción a derivados de 4-hidroxibencilamina.



Esquema 1: Reacción de tiramina con formaldehído.

Estudios computacionales mostraron que la formación de dímeros cíclicos esta termodinámicamente favorecida, a causa de interacciones por puentes de hidrogeno y de interacciones dispersivas entre los anillos aromáticos. El análisis espectroscópico mostro que la reacción con formaldehído produce el azaciclofano respectivo con una baja proporción de oligómeros lineales, mostrando que esta estrategia es útil para la obtención de azaciclofanos de 12 y 14 átomos (Esquema 2).



Esquema 1: Reacción de 4-hidroxibencilamina con formaldehído.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-433-P ***SÍNTESIS VERDE Y CARACTERIZACIÓN DE CONJUGADOS DE N-ARILOXIETIL-2-METIL-5-NITROIMIDAZOLES***

Síntesis Verde y Caracterización de Conjugados de *N*-Ariloxietil-2-metil-5-nitroimidazoles

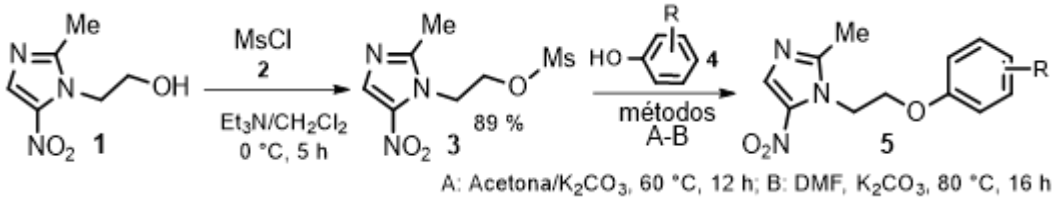
Karoll J. Rueda* [a], **Juan M. Urbina** [a], **Vladimir V. Kouznetsov** [a]

[a] *Laboratorio de Química Orgánica y Biomolecular (LQOBio), Escuela de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Industrial de Santander, Carrera 27 Calle 9, Bucaramanga, Colombia*
* *Autor de correspondencia: karoll2180088@correo.uis.edu.co*

Palabras Claves: Metronidazol; agentes antibacterianos; síntesis verde; O-alquilación de fenoles; DOZN ™ 2.0.

La investigación y desarrollo de medicamentos son uno de los pilares fundamentales más importantes para el crecimiento de nuestra sociedad. Durante estos procesos se crean nuevos fármacos, sin embargo, también se generan desechos farmacéuticos que conllevan una problemática ambiental. En este contexto, el caso de metronidazol (MTZ), un fármaco antiparasitario de amplio de acción; no es la excepción. En el presente trabajo, se emplea este fármaco como una plataforma verde que permite disminuir el tiempo y los gastos del desarrollo de nuevos agentes farmacéuticos, proponiendo una metodología basada en los principios de la química verde empleando el evaluador cuantitativo de química sostenible DOZN™.[1]

El MTZ (**1**) es un fármaco cuya estructura se basa en el anillo de imidazol con varios grupos funcionales disponibles para transformar y explorar nuevas dianas biológicas;[2] nuestro enfoque es específicamente en la modificación del grupo hidroxilo (–CH_2-CH_2-OH) por medio de una reacción *O*sulfonación tipo mesilación seguida de una *O*-arilación. Inicialmente, se aisló y purificó el principio activo de las pastillas vencidas de MTZ **1** trituradas en una mezcla de CH_2Cl_2:MeOH (3:1). Obtenido así, **1** fue luego tratado con el cloruro de metanosulfonilo (MsCl, **2**) en presencia de Et_3N a 0 °C para formar el éster sulfónico **3** (Esquema 1). Por medio de un estudio comparativo de los protocolos A-B de *O*-arilación con la herramienta DOZN™ 2.0, se determinó la metodología más "verde" siendo el método A de mejor puntuación en sus categorías de mejora del uso de los recursos, uso más eficiente de la energía y reducción al mínimo de los peligros para el ser humano y el medio ambiente.



Esquema 1. Síntesis de *N*-ariloxietil-2-metil-5-nitroimidazoles a partir de pastillas vencidas de MTZ.

Reaccionando **3** con diferentes fenoles **4** (acetona, K_2CO_3, 60 °C, 12 h), se obtuvieron los productos deseados, *N*-ariloxietil-MTZ **5**, caracterizados mediante las técnicas IR, RMN, ^{1}H, ^{13}C y MS; de esta manera se espera demostrar la utilidad de los fármacos vencidos y su vez aportar a los avances en la química medicinal.

Bibliografía

1. Sharma, P.; Vetter, C.; Ponnusamy, E.; Colacino, E. *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2022**, 10, 5110–5116.
2. Patel, O. P.; Jesumoroti, O. J.; Legoabe, L. J.; Beteck, R. M. *Eur. J. Med. Chem.* **2021**, 210, 112994.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-441-P ***SÍNTESIS MECANOQUÍMICA DE DERIVADOS DE 2-ANILINO-3-CLORO-1,4-NAFTOQUINONAS CATALIZADA POR SULFATO DE ALUMINIO MINERAL.***

Síntesis Mecanoquímica de Derivados de 2-Anilino-3-Cloro-1,4-Naftoquinonas Catalizada por Sulfato de Aluminio Mineral.

Ana D. Antonio*, Wilson E. Rozo Núñez, Agobardo Cárdenas Chaparro

Laboratorio de Diseño y Síntesis de Sistemas Químicos (DiSi$_2$Quim), Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja-Boyacá, Colombia.

* ana.antonio@uptc.edu.co

Palabras Claves: Mecanoquímica; 1,4-Naftoquinonas; Alumbre; Reacción sin disolvente.

Las naftoquinonas son compuestos α,β-insaturados formados por dos anillos fusionados; su núcleo estructural está ampliamente distribuido en la naturaleza, caracterizándose por ser sustancias muy coloreadas. Dada la presencia del grupo quinona son compuestos que presentan propiedades de óxido-reducción y ácido-base, otorgando propiedades biológicas reconocidas (antifúngicas, antitumorales, anticancerígenas, antiparasitarios, entre otras). El método más utilizado para la obtención de derivados de la 2-Anilino-3-Cloro-1,4-Naftoquinona (figura 1) requiere condiciones de reflujo en solventes orgánicos de hasta 48 horas, mediante una sustitución nucleofílica catalizada por ácidos de Lewis, siendo el cloruro de cerio el que presenta mejores resultados.

Debido a la importancia de estos derivados en la industria farmacéutica, en este trabajo se propone una nueva alternativa de obtención mediante síntesis mecanoquímica catalizada por sulfato de aluminio mineral (alumbre). El método verde no requiere del uso de solventes, disminuye costos energéticos y tiempos de reacción entre 4-8 horas, presenta buenos rendimientos y los productos se obtienen en alta pureza. Sumado a lo anterior, el alumbre comercial es de fácil acceso y bajo costo.

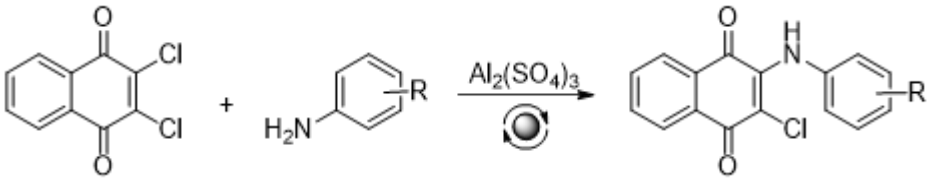


Figura 1. Síntesis mecanoquímica de derivados de la 2-Anilino-3-Cloro-1,4-Naftoquinona.

Referencias.

[1] Cárdenas-Chaparro, A.; Leyva, E.; Loredo-Carrillo, SE; Carranza, V. "Síntesis de derivados de 2-anilino-3-cloro-1,4-naftoquinona promovida por microondas y ultrasonido". *Afinidad. Revista de Química Teórica y Aplicada de Ingeniería Química*, 2017, vol. 74, núm. 580, https://raco.cat/index.php/afinidad/article/view/329846

Ávila-Ortiz, C. G., Pérez-Venegas, M., Vargas-Caporali, J., & Juaristi, E. (2019). Recent applications of mechanochemistry in enantioselective synthesis. Tetrahedron Letters, 60(27), 1749-1757. https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2019.05.065

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

O-Sulfonilación regioselectiva de 3-cianopiridin-2(1*H*)-onas 4,6-diarileadas

Diana C. Hurtado [a], Hugo A. Rojas [a], Jaime A. Portilla [b], Diana K. Becerra [a,*] y Juan C. Castillo [a,*]

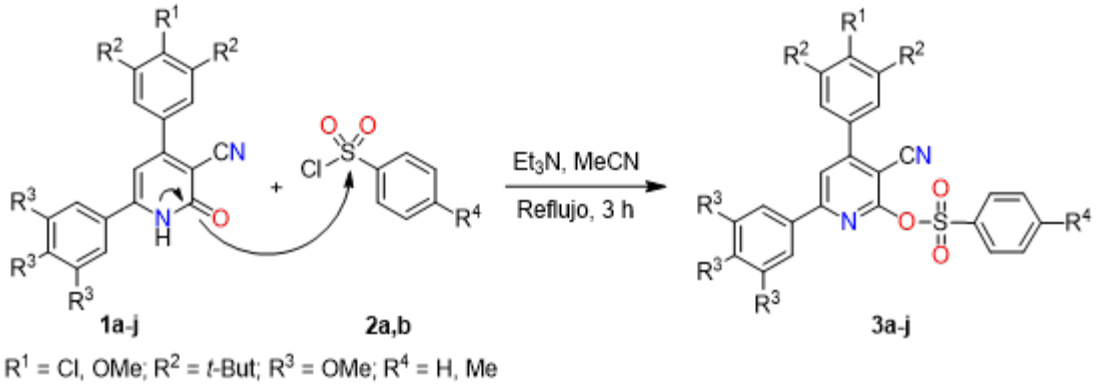
[a] *Grupo de Catálisis de la UPTC, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Colombia*
[b] *Grupo de Investigación en Compuestos Bio-orgánicos, Universidad de los Andes, Colombia*

** Autores de correspondencia: diana.becerra08@uptc.edu.co, juan.castillo06@uptc.edu.co*

Palabras Claves: 3-Ciano-2(1*H*)-piridonas; *O*-sulfonilación; regioselectividad

En años recientes, se ha investigado las isoformas del citocromo P450 (CYP) como una prometedora vía para activar selectivamente pro-fármacos en tejidos de cáncer de seno [1]. La isoforma CYP1A1, presente en el cáncer de seno, es interesante debido a su rol en la carcinogénesis. En este contexto, se ha explorado el uso de sistemas de bencenosulfonato de fenilo, que son inactivos en células normales pero provocan citotoxicidad en células de cáncer de seno con CYP1A1, bloqueando su ciclo celular y llevando a la muerte celular [1]. A pesar de los estudios previos en las reacciones de sulfonilación de sistemas *N*-heterocíclicos [2], hasta la fecha no se ha establecido un protocolo eficiente y simple para la sulfonilación regioselectiva de la 3-cianopiridin-2(1*H*)-ona (lactama), la cual se encuentra en equilibrio tautomérico con la 3-ciano-2-hidroxipiridina (lactima) [3].

Para abordar este desafío, se llevó a cabo la síntesis de 3-ciano-2(1*H*)-piridonas 4,6-diariladas **1** mediante una reacción multicomponente que involucra aldehídos (hetero)aromáticos, 2-cianoacetamida, acetofenonas sustituidas y acetato de amonio. Posteriormente, se logró la obtención regioselectiva de las 3-cianopiridinas *O*-sulfoniladas **3a–j** con buenos rendimientos mediante la reacción de *O*-sulfonilación de las 2-hidroxipiridinas, las cuales están en equilibrio tautomérico con las 3-cianopiridin-2(1*H*)-onas **1a–j**, empleando cloruros de arilsulfonilo **2a,b** y trietilamina como base en acetonitrilo bajo condiciones de reflujo por 3 horas (Esquema 1).



Esquema 1. Síntesis regioselectiva de 3-cianopiridinas *O*-sulfoniladas **3**.

La estructura de las 3-cianopiridinas *O*-sulfoniladas **3a–j** fue confirmada mediante técnicas espectroscópicas como espectroscopía de infrarrojo y resonancia magnética nuclear así como espectrometría de masas de alta resolución. En conclusión, este protocolo sintético se destaca por su simplicidad operacional, buenos rendimientos (que varían desde un 91% hasta rendimientos cuantitativos) y una excelente regioselectividad que privilegia la *O*-sulfonilación sobre la *N*-sulfonilación.

[1] Chavez-Alvarez, A.C., Bouzriba, C., Moreau, E., Auzeloux, P., Besse, S., Ouellette, V., Zarifi-Khosroshahi, M., Côté, M.F., Pilote, S., Miot-Noirault, E., Chezal, J.M., Simard, C., C-Gaudreault, R., Fortin, S. *J. Med. Chem.* **2023**, *66*, 2477–2497.
[2] Salinas-Torres, A., Portilla, J., Rojas, H., Becerra, D., Castillo, J.-C. *Molbank* **2022**, *2022*, M1387.
[3] Hurtado, D., Salinas, A., Rojas, H., Becerra, D., Castillo, J.-C. *RSC Adv.* **2022**, *12*, 35158–35176.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-453-P ***SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NUEVOS HÍBRIDOS MOLECULARES DE LA QUINOLINA ENLAZADA A UNIDADES ESTIRILO Y CHALCONA, POTENCIALES AGENTES ANTIOXIDANTES***

Síntesis y Evaluación de Nuevos Híbridos Moleculares de la Quinolina Asociado a Unidades Estirilo-Chalcona Como Potencial Agente Antioxidante.

Carlos A. Bermúdez [a] **,Wilmar A. Capacho** [b]**, Arnold R. Romero Bohórquez** [c]*

[a,b,c] Grupo de Investigación de Compuestos Orgánicos de Interés Medicinal (CODEIM), Parque Tecnológico Guatiguará, Universidad Industrial de Santander, A.A. 678, Piedecuesta, Colombia.
carlos.bermudez2@correo.uis.edu.co, arafrom@uis.edu.co

Palabras clave: quinolina; estirilquinolina; chalcona; híbridos moleculares.

RESUMEN

Actualmente, el desarrollo de nuevos fármacos antioxidantes es de vital importancia, ya que recientes investigaciones sugieren que las especies reactivas de oxígeno (ERO) están relacionadas con el estrés oxidativo (EO)[1]. La quinolina y sus derivados heterocíclicos fusionados a través de la hibridación molecular demuestran diversa actividad biológica, al combinar dos o más unidades farmacóforicas en una sola estructura constituyendo una clase importante de moléculas para el desarrollo de nuevos fármacos, ayudando a reducir las ERO[2]. Las metodologías desarrolladas en los pasos sintéticos fueron como primer paso la síntesis de quinolina a partir de precursores acíclicos, por medio de la reacción de Doebner-Miller[3], una vez obtenido se procede con el segundo paso que resulta de la condensación tipo Perkín[4] entre la quinolina y un aldehído para formar estirilquinolinas, por último, se procede a formar el hibrido molecular chalcona-estirilquinolina a partir de la reacción de condensación de Claisen-Schmidt. con rendimientos entre el 40 y el 75% respectivamente. Fue posible acceder y caracterizar espectroscópicamente el set de nuevos derivados híbridos chalcona-estirilquinolina, mediante una metodología sintética que involucro tres pasos sintéticos, partiendo de sustratos con estructura relativamente simple y de fácil accesibilidad.

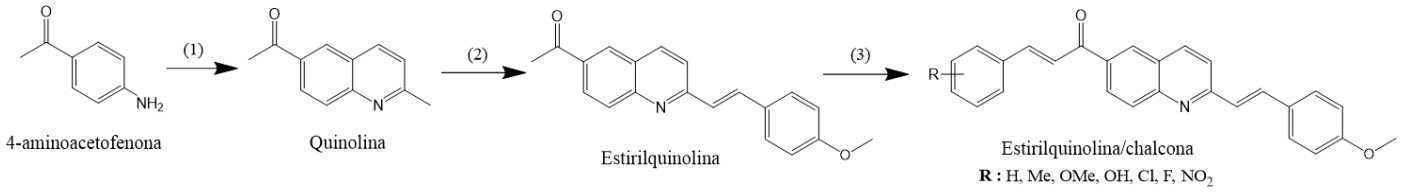


Figura 1. Esquema simplificado de los híbridos estirilquinolina/chalcona.

Agradecimientos: A la Universidad Industrial de Santander y la Vicerrectoría de Investigaciones y Extensión por el soporte económico para llevar a cabo la investigación.

Bibliografía

[1] Rajendran P, Nandakumar N, Rengarajan T, Palaniswami R, Gnanadhas , Lakshminarasaiah U, Gopas J Y Nishigaki I. 2014. Antioxidantes y enfermedades humanas. Clin Chim Acta 436: 332-347.
[2] Suresh Kumar, Sandhya Bawa And Himanshu Gupta, Biological Activities of Quinoline Derivatives, New Delhi-110062, India, Reviews in Medicinal Chemistry, 2009, 9, 1648-1654.

Síntesis de Nuevos Híbridos Moleculares 4-(4-Hidroxi-3-Metoxifenil) Tetrahidroquinolina/1,2,3-Triazol, Compuestos con Potencial Actividad Anticancerígena

Leidy J. Marín [a*], **Wilmar A. Capacho** [b], **Arnold R. Romero** [c*]

[a,b,c] *Grupo de Investigación de Compuestos Orgánicos de Interés Medicinal (CODEIM), Universidad Industrial de Santander, Colombia*

** Autor de correspondencia: leidy2170152@correo.uis.edu.co*

Palabras Claves: Tetrahidroquinolina; Triazol; Reacción de Povarov; Cicloadición 1,3-dipolar.

El cáncer es una de las enfermedades que ocasiona más muertes a nivel global, siendo la causa de muerte de una de cada seis personas en el mundo, dentro de las cuales 54,987 fueron registradas en Colombia solo en el 2020[1]. Las tetrahidroquinolinas y los 1,2,3-triazoles son compuestos de los cuales se ha encontrado que algunos de sus derivados exhiben actividad anticancerígena[2]. Mediante la reacción de Povarov catiónica se puede acceder a derivados *N*-propargil-tetrahidroquinolina, a partir de los cuales se pueden obtener 1,2,3-triazoles mediante la reacción de cicloadición 1,3-dipolar catalizada con cobre[2].

Para obtener los híbridos tetrahidroquinolina-triazol primero se sintetizaron las correspondientes *N*-propargil tetrahidroquinolinas (**5a-f**), con rendimientos de 50-70%, por medio de la reacción de Povarov catiónica entre las *N*-propargilanilinas (**3a-f**) y el 2-metoxi-4-vinilfenol (**4**). Posteriormente, los híbridos moleculares de 4-(4-hidroxi-3-metoxifenil) tetrahidroquinolina/1,2,3-triazol (**7a-p**), se sintetizaron por medio de una cicloadición 1,3-dipolar de Huisgen, a partir de las *N*-propargil tetrahidroquinolinas y las respectivas azidas (**6a-f**) con rendimientos entre 80-90%.

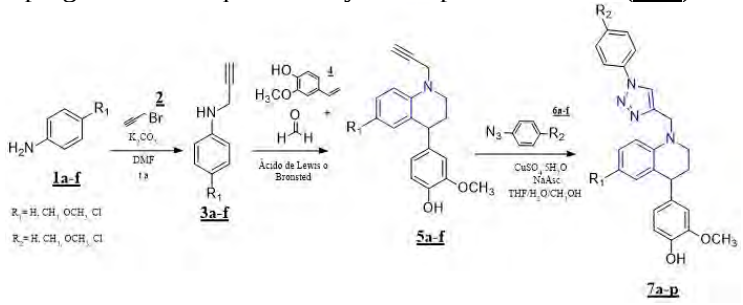


Figura 1. Esquema general de la síntesis de híbridos de tetrahidroquinolina-triazol.

Agradecimientos: A la universidad Industrial de Santander por la financiación del proyecto VIE-3737

Bibliografía

[1] Bradbury, R. H. (2007). Overview. In R. H. Bradbury (Ed.), Cancer (pp. 1–17). Springer Berlin Heidelberg. https://doi.org/10.1007/7355_2006_001

[2] Rodriguez Núñez, Y. A., Norambuena, M., Romero Bohorquez, A. R., Morales-Bayuelo, A., & Gutíerrez, M. (2019). Efficient synthesis and antioxidant activity of novel N-propargyl tetrahydroquinoline derivatives through the cationic Povarov reaction. Heliyon, 5(8), e02174. https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2019.e02174

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-460-P ***LA CONDENSACIÓN DE CLAISEN–SCHMIDT Y LA ADICIÓN AZA-MICHAEL COMO PASOS CLAVE EN LA SÍNTESIS EFECTIVA DE NUEVOS HÍBRIDOS MOLECULARES 7–(2,4–DIMETILQUINOLIN–3–IL)–1,3–DIMETIL–5–ARILPIRIDO[2,3–D]PIRIMIDINA–2,4(1H,3H)–DIONA***

La Condensación de Claisen–Schmidt y la Adición aza-Michael como Pasos Clave en la Síntesis Efectiva de Nuevos Híbridos Moleculares 7–(2,4–dimetilquinolin–3–il)–1,3–dimetil–5–arilpirido[2,3–*d*]pirimidina–2,4(1*H*,3*H*)–diona

Elizabeth N. Gómez,[a] Diego F. Rodríguez,[a] Diana M. Ardila,[a] Diana R. Vera,[a] Geraldine Álvarez,[a] Alirio Palma.[a*]
[a] Laboratorio de Síntesis Orgánica, Escuela de Química, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.
*e–mail: apalma@uis.edu.co

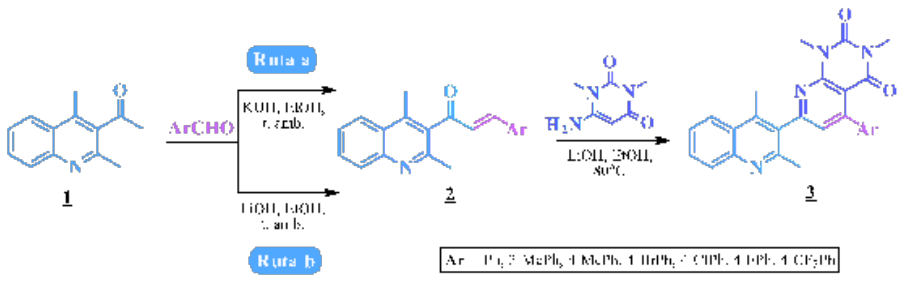
Palabras clave: Híbridos moleculares; quinolinil–chalcona; pirido[2,3–*d*]pirimidina; Condensación de Claisen-Schmidt;

INTRODUCCIÓN

Los sistemas heterocíclicos privilegiados de la pirido[2,3–*d*]pirimidina, la quinolina, y las chalconas, han sido estudiados intensamente debido a las múltiples manifestaciones biológicas que exhiben sus derivados.[1–3] Es por esta razón que, con asistencia de la Hibridación Molecular, estas estructuras se emplean como hormas moleculares para el desarrollo de compuestos con propiedades biológicas prometedoras.[2,3] Enmarcados en este contexto, y con el propósito de extender los alcances sintéticos de las metodologías desarrolladas en el LSO,[4] en el presente trabajo se describe la síntesis de dos pasos y su versión one–pot de nuevos híbridos moleculares del tipo 7–(2,4–dimetilquinolin–3–il)–1,3–dimetil–5–arilpirido[2,3–*d*]pirimidina–2,4(1*H*,3*H*)–diona **3**, usando para ello a **1** como precursor estratégico, y la condensación de Claisen–Schmidt en combinación con la adición aza-Michael como los pasos clave de dicha síntesis.

MÉTODOS Y RESULTADOS

Los híbridos **3** se sintetizaron a través de dos rutas de síntesis (Esquema 1). Por la **ruta a**, en el primer paso, se hicieron reaccionar **1**, sintetizada previamente vía anulación de Friedländer,[4] con aldehídos aromáticos en solución etanólica de KOH a temperatura ambiente, para la formación de los intermediarios **2**. Después de su purificación e identificación, se sometieron a un proceso de ciclocondensación con un ligero exceso de 6–amino–1,3–dimetiluracilo (6ADMU) en solución etanólica de LiOH a reflujo. Por la **ruta b**, las chalconas **2** se sintetizaron de la misma manera que por la **ruta a**, pero usando LiOH como base. Una vez se constató su formación, sin aislarlas se adicionó la misma cantidad de 6ADMU a la mezcla de reacción, y seguidamente se calentó a 80ºC. A través de estas dos rutas de síntesis, se prepararon, hasta la fecha, 7 híbridos **3** con rendimientos buenos y equiparables, en ambos casos. Las estructuras de estos híbridos fueron corroboradas por las técnicas espectroscópicas convencionales de elucidación estructural (RMN $^{1}H/^{13}C$, HR–MS e IR).



Esquema 1. Síntesis de los híbridos 7–(2,4–dimetilquinolin–3–il)–1,3–dimetil–5–arilpirido[2,3–*d*]pirimidina–2,4(1*H*,3*H*)–diona **3**.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

CONCLUSIÓN

La metodología one–pot recién descrita constituye a una alternativa sencilla y eficiente para llevar a cabo la construcción directa de nuevos híbridos moleculares quinolina–piridopirimidina **3** de potencial interés biológico para la química medicinal.

REFERENCIAS

1. Yadav, P. & Shah, K. *Chem. Biol. Drug Des.*, **97**, 633–648 (2021); 2. Atukuri, D., Vijayalaxmi, S., Sanjeevamurthy R., *et al*. *Bioorg. Chem.*, **105**, 104419 (2020).; 3. Kar Mahapatra, D. *Expert Opin. Ther. Pat.*, **29**, 385–406 (2019).; 4. Palma, A., Meléndez, A., *et al*. *Synthesis*, **52**, 1804–1822 (2020).

AGRADECIMIENTOS: Este trabajo fue financiado por la vicerrectoría de Investigación y Extensión UIS, proyecto 3918

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

I-468-P SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL DE NUEVOS DERIVADOS DE N-ACETONITRIL-4-(2'-OXOPIRROLIDIN-1'-IL)- 1,2,3,4-TETRAHIDROQUINOLINA VÍA REACCIÓN POVAROV CATIÓNICA, CON POTENCIAL ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE.

Síntesis y Caracterización Estructural de Nuevos Derivados de *N*-Acetonitril-4-(2'-oxopirrolidin-1'-il)-1,2,3,4-Tetrahidroquinolina vía Reacción Povarov Catiónica, con Potencial Actividad Antioxidante.

Tania S. Tabares[a*], Fausto A. Marín[a], Arnold R. Romero[a*]

[a] *Compuestos Orgánicos De Interés Medicinal (CODEIM), Parque tecnológico Guatiguará, Universidad Industrial de Santander, A.A. 678, Piedecuesta, Colombia*

* *Autor de correspondencia: tania.tabares@correo.uis.edu.co ,arafrom@uis.edu.co*

Palabras Claves: Tetrahidroquinolinas; reacción Povarov catiónica; ácido de Lewis; amidoximas; antioxidante.

Las tetrahidroquinolinas (THQs) son análogos reducidos de quinolinas; cuyo foco de interés se basa en la búsqueda de derivados que exhiban potencial bioactivo y al estudio de rutas sintéticas eficaces para su obtención. Dentro de los métodos reportados, la reacción de Povarov catiónica es una de las más empleadas dado que permite un acceso fácil y eficiente al anillo de THQ, a través de una reacción de tres componentes. Por su parte, las amidoximas (AMX) son moléculas que resaltan por ser dualmente funcionales como precursores en la síntesis de compuestos heterocíclicos empleados en la química farmacéutica.

En el presente estudio fue sintetizada una serie de compuestos derivados de *N*-acetonitril-1,2,3,4-tetrahidroquinolina (Figura 1) con potencial mejora en su actividad antioxidante. Los núcleos de THQ **(2a-e)** fueron obtenidos a través de una reacción de Povarov catiónica a partir de *N*-vinil-2-pirrolidona, formaldehido y *N*-acetonitrilanilinas-*p*-sustituidas **(1a-e)** previamente sintetizadas mediante una reacción clásica de sustitución nucleofílica. El trabajo incluye la búsqueda de condiciones óptimas para dicha síntesis, con un estudio de diversos catalizadores que abarcan ácidos de Lewis y Brønsted. Los núcleos intermediarios **(2a-e)** fueron finalmente transformados a sus derivados *N'*-hidroxi-2-(4-(2-oxopirrolidin-1-il)-3,4-dihidroquinolin-1(2H)-il)acetimidamidas **(3a-e),** mediante un ataque nucleofílico sobre el grupo nitrilo**.** Se espera que el grupo amidoxima presente en la estructura molecular, aumente su capacidad de eliminación de radicales libres. Finalmente, se obtuvo nuevos derivados del núcleo de 1,2,3,4-tetrahidroquinolina mediante una ruta sintética eficiente, empleando la reacción de Povarov catiónica catalizada por $BiCl_3$, con altos rendimientos de reacción (67-92%) y promisorio potencial antioxidante.

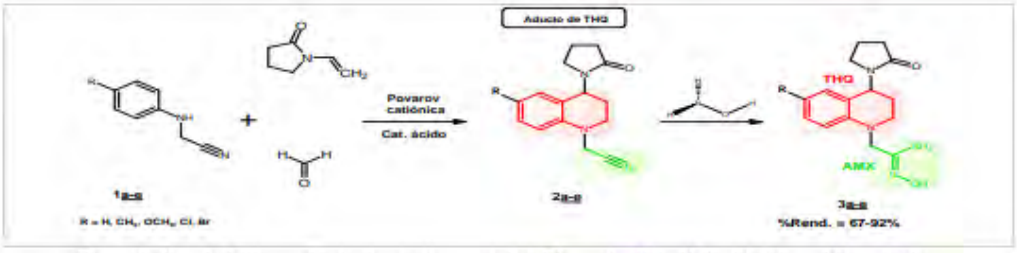


Figura 1. Síntesis de Nuevos Derivados de *N*-acetonitril-4-(2'-oxopirrolidin-1'-il)- 1,2,3,4-tetrahidroquinolina.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

III-200-P ***ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LA ABSORCIÓN Y LA FLUORESCENCIA DE LOS DERIVADOS BUTADIENIL Y ESTIRIL DE LA METILFEOFORBIDA A Y DE LA ZN-METILFEOFORBIDA A***

Estudio Computacional de la Absorción y la Fluorescencia de los Derivados Butadienil y Estiril de la Metilfeoforbida a y de la Zn-Metilfeoforbida a

Juan C. Reyes [a],* Markus Doerr [a], Martha C. Daza [a]

[a] *Grupo de Bioquímica Teórica GBQT, Universidad Industrial de Santander, Colombia*
**Autor de correspondencia: juan.reyes6@correo.uis.edu.co*

Palabras Claves: TD-CAM-B3LYP; fluorescencia; sondas de fluorescencia; metilfeoforbida a.

Los derivados de la metilfeoforbida a presentan un coeficiente de absorción y rendimientos cuánticos de fluorescencia altos y absorben en el rojo, lo que los hace útiles como sondas de fluorescencia. Con el fin de contribuir a un diseño racional de derivados de la metilfeoforbida a y de la Zn-metilfeoforbida a se evaluó el efecto de los sustituyentes butadienil y estiril sobre los espectros de absorción y fluorescencia con el funcional TD-CAM-B3LYP y la base def2-SVP. Para la selección del confórmero de menor energía de estos fotosensibilizadores se realizó una exploración conformacional y una optimización del mínimo de más baja energía con TD-CAM-B3LYP/def2-SVP. Los resultados indican que los derivados Zn-butadienil-metilfeoforbida a y Zn-estiril-metilfeoforbida a presentan un mayor desplazamiento (21,1 nm) y (18 nm) batocrómico de los máximos de las bandas Q_y y un incremento en la fuerza del oscilador en comparación con sus derivados sin Zn. El derivado Zn-butadienil-metilfeoforbida a presenta un corrimiento batocrómico de 3,9 nm en comparación con el derivado Zn-estiril-metilfeoforbida a. La constante de fluorescencia de estiril-metilfeoforbida a y de la butadienil-metilfeoforbida a son del orden de 4 x108 s-1 con un máximo de fluorescencia en 665 nm y 688 nm, respectivamente. La Zn-butadienil-metilfeoforbida a presenta las mejores propiedades fotofísicas.

III-201-P ***ESTUDIO COMPUTACIONAL SOBRE EL ESPECTRO INFRARROJO DEL COMPONENTE MAYORITARIO DE LA ESTEVIA (ESTEVIÓSIDO)***

Estudio Computacional sobre el Espectro Infrarrojo del Componente Mayoritario de la Estevia (Esteviósido)

Juan Diego Enríquez Ramos[aψ], Vaneza P. Lorett Velásquez[b] y Cristian Buendía-Atencio[c]*
[a] Universidad Antonio Nariño, Facultad de Ciencias, Bogotá D. C., Colombia.
[b] Universidad Militar Nueva Granada, Facultad de Ciencias Biomédicas, Bogotá D. C., Colombia.
[ψ] Semillero De Química Computacional

*Corresponding author: c.buendia@uan.edu.co

Palabras Claves: Estevia y derivados; Espectrocopía vibracional; Química Computacional; DFT.

Los productos que contienen Estevia como edulcorante son muy demandados en la actualidad debido a que pueden ser consumidos por pacientes diabéticos. Los componentes principales de las hojas de estevia son el esteviósido y el rebaudiósido A los cuales se caracterizan por ser entre 200-300 y 400 veces más dulce que el azúcar, respectivamente [1]. La popularidad de la estevia ha aumentado durante los últimos años y, al mismo tiempo, también ha aparecido en el mercado la falsificación de productos a base de estevia. Las instituciones de control están empleando técnicas y métodos analíticos basados en la espectroscopia vibracional Infrarrojo y Raman que les permitan responder de manera rápida y eficiente, las verificaciones in situ de la calidad de los productos. [2] En este trabajo se compararon los datos experimentales reportados del estándar de esteviósido con las bandas vibracionales armónicas estimadas empleando la teoría funcional de la densidad (DFT-B3LYP/6-311G(*d*,*p*)). Como punto de partida, la estructura química del esteviósido se obtuvo a partir de datos de cristales disponibles en Cambridge Structural Database (CSD) [3]. Con esta información, la estructura de equilibrio y las frecuencias vibracionales fueron calculadas con el programa Gaussian 09. El espectro IR del esteviósido principalmente muestra tres bandas bien definidas, una banda de intensidad media comprendida un rango entre 3580-3728 cm^{-1} que corresponde al conjunto de streching O-H de los grupos glucosídicos, otra banda de alta intensidad y corresponde al conjunto de streching C-H entre 2864-3113 cm^{-1} y finalmente una banda de intensidad baja a 1664 cm^{-1} que corresponde al streching C=CH_2, en la última sección del espectro entre 13-1483 cm^{-1} hay muchas frecuencias de muy baja intensidad que corresponden a dos bandas bien definidas, la primera de ellas corresponde a los bending O-H glucosídicos y otra a los bending CH_2 en toda la estructura. Para el esteviósido la desviación cuadrática media (RMSD) es de 0,31 Los valores de RMSD fueron obtenidos con la ecuación (1) donde *N* son las posiciones de los átomos en el plano *x* y *y*, $w_{(i)}$ es el factor de ponderación.

$$RMSD(N;x,y)=[\sum_{Ni=1}w_i\|x_i-y_i\|_2N\sum_{Ni=1}w_i]_{12}\left(\frac{1}{}\right)\quad RMSDN;x,y=\sum i=1Nwi\|xi-yi\|2N\sum i=1Nwi12 \quad (1)$$

En conclusión el método B3LYP combinado con el conjunto de base 6-311G(*d*,*p*) es ideal para estimar las propiedades vibracionales de moléculas de mediano tamaño como el esteviósido derivados de la estevia, los datos reportados ayudan a su identificación y caracterización química.

Bibliografía

[1] Goyal SK, Samsher, Goyal RK, *International Journal of Food Sciences and Nutrition* 2010; **61**: 1-10.
[2] Vargas Jentzsch P, Ciobotă V, *Flavour and Fragrance Journal* 2014; **29**: 287-295.
[3] Wu Y, Rodenburg DL, Ibrahim MA, McChesney JD, Averya MA, *Acta Crystallographic 2013*. E69, o410–o411.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-202-P ***EVALUACIÓN DE GFN-FF Y GFN-XTB PARA EL ESTUDIO DE INTERACCIONES ENTRE NANOPARTÍCULAS DE AG CON MOLÉCULAS PEQUEÑAS***

Evaluación de GFN-FF y GFN-xTB para el Estudio de Interacciones entre Nanopartículas de Ag con Moléculas Pequeñas

Jhon F. Moreno[a]*, Markus Doerr[a], Martha C. Daza[a]

[a] *Grupo de Bioquímica Teórica GBQT, Universidad Industrial de Santander, Colombia*

* *Autor de correspondencia: jhonfmoreno445@gmail.com*

Palabras Claves: GFN-FF; GFN-xTB; DFT; nanopartículas metálicas.

Las nanopartículas metálicas de plata interaccionan con macromoléculas biológicas y orgánicas, presentando excelentes propiedades ópticas, electrónicas y catalíticas. Esto ha dado lugar a su aplicación en diversos campos: nanomedicina, nanotoxicidad y catálisis, entre otras. Para comprender sus propiedades estructurales son necesarios métodos computacionales robustos debido al tamaño y complejidad de los sistemas. Recientemente se propusieron el campo de fuerza GFN-FF y el método semiempírico GFN-xTB para describir estructuras grandes. GFN-FF es prometedor debido a su automatización y al número de parametrizaciones, mientras que GFN-xTB combina la parte mecano-cuántica con parametrizaciones para tratar al sistema de manera simplificada. Con estos métodos se puede tratar una amplia variedad de estructuras químicas con un costo computacional bajo. Estos métodos se han aplicado a sistemas orgánicos y organometálicos con buenos resultados, pero no a complejos de nanopartículas metálicas con moléculas orgánicas.

Evaluamos la eficiencia de GFN-FF y GFN-xTB en el estudio de las interacciones de nanopartículas metálicas de plata (Ag_{55}) con moléculas orgánicas (2-propanol y 2-propanoamina) en comparación con los niveles de teoría PBEh-3c, PBE-D3/def2-SVP y B97-3c/def2-TZVP. Con GFN-xTB, las energías de interacción y longitudes de enlace Ag-N y Ag-O son similares a las obtenidas con los niveles de teoría PBEh-3c y PBE-D3/def2-SVP, las diferencias en energía son inferiores a 6 kcal/mol y las diferencias en las longitudes de enlace inferiores a 0.2 Å. Con GFN-FF las energías de interacción y las longitudes de enlace Ag-N y Ag-O difieren de las obtenidas con los niveles de teoría PBEh-3c, PBE-D3/def2-SVP y B97-3c/def2-TZVP, las energías difieren en un rango de 4 a 32 kcal/mol y las longitudes de enlace Ag-N y Ag-O difieren entre 0.2 Å y 0.5 Å. En conclusión, GFN-xTB puede describir las interacciones entre nanopartículas metálicas y moléculas orgánicas con un nivel de precisión cercano al de los niveles de teoría PBEh-3c y PBE-D3/def2-SVP.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-203-P ***CÁLCULO DE ENERGÍAS DE LOS PRIMEROS ESTADOS EXCITADOS SINGLETE Y TRIPLETE, Y ESPECTROS DE ABSORCIÓN Y DE FLUORESCENCIA CON RESOLUCIÓN VIBRACIONAL DEL TRIMETIL ÉSTER DE CLORINA E6 Y SU DERIVADO CON ZINC***

Cálculo de Energías de los Primeros Estados Excitados Singlete y Triplete, y Espectros de Absorción y de Fluorescencia con Resolución Vibracional del Trimetil Éster de Clorina e6 y su Derivado con Zinc

Marlon D. Suárez[a]*, **Markus Doerr**[a], **Martha C. Daza**[a]

[a]*Grupo de Bioquímica Teórica, Universidad Industrial de Santander, Colombia*
**Autor de correspondencia:* marlon9801@hotmail.com*

Palabras Claves: fotosensibilizador; clorina-e6; absorción; fluorescencia; resolución vibracional

El desarrollo de nuevos fotosensibilizadores es un área de investigación activa. Sus propiedades fotofísicas se pueden estudiar computacionalmente[1,2], permitiendo el diseño racional de nuevos fotosensibilizadores. El trimetil éster de clorina e6 y su complejo con zinc son potenciales fotosensibilizadores derivados de la clorofila. Se realizó una exploración conformacional con CREST y CENSO. Se optimizó el confórmero de menor energía con (TD-)CAM-B3LYP y la base def2-SVP y se calcularon sus espectros de absorción y fluorescencia con resolución vibracional. Se tomaron las transiciones $S_0 \rightarrow S_1$, y $S_0 \rightarrow S_2$ para el cálculo de los espectros de absorción. Para el cálculo del espectro de fluorescencia y su de velocidad se tomó la transición $S_1 \rightarrow S_0$.

Los espectros de absorción calculados concuerdan muy bien con los experimentales, presentan una diferencia de 0.01 eV, más notable en su complejo con zinc de 0.05 eV. La presencia de zinc muestra un desplazamiento de las bandas de menor energía de 0.03 eV hacia el azul ya visto en la literatura. Ambos espectros replican las bandas experimentales presentes en la región Q. Los espectros de fluorescencia son imagen especular centrados en la banda de absorción de menor energía con 2 bandas, una tipo hombro con 2 picos entre 1.67-1.79 eV. Las velocidades de fluorescencia calculadas son de 3.69×10^8 s^{-1} y 4.35×10^8 s^{-1} para la molécula y su complejo respectivamente.

Referencias

(1) de Souza, B.; Neese, F.; Izsák, R. On the Theoretical Prediction of Fluorescence Rates from First Principles Using the Path Integral Approach. J. Chem. Phys. 2018, 148 (3), 034104. https://doi.org/10.1063/1.5010895.
(2) Castro Júnior, J. G. M.; Rocha, W. R. Theoretical Investigation of [Ru(Bpy)2(HAT)]2+ (HAT = 1,4,5,8,9,12-Hexaazatriphenylene; Bpy = 2,2′-Bipyridine): Photophysics and Reactions in Excited State. Spectrochim. Acta. A. Mol. Biomol. Spectrosc. 2022, 270, 120817. https://doi.org/10.1016/j.saa.2021.120817.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-204-P ***EVALUACIÓN COMPUTACIONAL DE LA ACTIVIDAD ANTIINFLAMATORIA DE COMPUESTOS OBTENIDOS A PARTIR DE SUBPRODUCTOS (SEMILLA Y CORTEZA) DEL AGUACATE (PERSEA AMERICANA MILL.)***

Evaluación Computacional de la Actividad Antiinflamatoria de Compuestos Obtenidos a partir de Subproductos (Semilla y Corteza) del Aguacate *(Persea americana Mill.)*

Gabriel S Ascuntar[a]*, **Cesar A Mujica**[a]

a Grupo de Investigación en Fisicoquímica Básica y Aplicada – GIFBA, Departamento de Química, Universidad de Nariño, 520002, Pasto, Colombia
** Autor de correspondencia: gabogs1998@gmail.com*

Palabras Claves: Ciclooxigenasa*;* Acido Araquidónico; Selectividad; Acoplamiento; Flavonoides.

La ciclooxigenasa (COX) es una enzima importante en la producción de prostaglandinas, y sus dos formas COX-1 y COX-2 tienen funciones específicas y regulación diferente. La inhibición de la COX-2 es el mecanismo de acción principal de los medicamentos que se utilizan para tratar el dolor y la inflamación; sin embargo, los fármacos actuales exhiben algún tipo de efecto secundario. Por otro lado, los productos naturales han sido usados como medicamentos o precursores de los mismos para el tratamiento de diversas enfermedades, en particular, porque los metabolitos secundarios han evolucionado para ser bioactivos y, por lo tanto, presentan menores efectos secundarios [1]. En este trabajo se evaluó la actividad antiinflamatoria de compuestos obtenidos a partir de subproductos (semilla y corteza) del aguacate (*Persea americana Mill*.) recientemente extraídos y caracterizados por Hurtado y colaboradores [2].
Usando acoplamiento molecular, se obtuvo la energía de enlace de 70 compuestos comerciales de tipo AINEs, COXIBs y compuestos fenólicos derivados del aguacate frente a COX-1 y COX-2. Los resultados indicaron que los compuestos fenólicos que presentaron mejor selectividad para COX-2 fueron: ácido 5-O-cafeoilquínico, quercetina-3-O-glucósido, quercetina-3-O-rutinosido y quercetina diglucosido, mientras que los compuestos fenólicos con mejor selectividad para COX-1 fueron quercetina-3-O-ramnósido y florizina. Adicionalmente se determinaron las propiedades ADME las cuales indicaron con la energia de acoplamiento que los compuestos fenólicos se encuentran en los rangos establecidos por los 70 compuestos comerciales concluyendo asi que tienen una potencial actividad antinflamatoria.

Referencias:

[1] Beutler, J. A.; *Curr. Protoc. Pharmacol.* **2019**, 86, e67.
[2] Rosero, J. C.; Cruz S.; Osorio C.; Hurtado N.; *Molecules*. **2019**, 24(17), 3209.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Estudio Teórico de los Procesos Fotofísicos de la Metilfeoforbida a

Hernán D. Rueda[a]*, Martha C. Daza[a], Markus Doerr[a]

[a] *Grupo de Bioquímica Teórica, Universidad Industrial de Santander, Colombia*
** Autor de correspondencia: hernandario_rueda@hotmail.com*

Palabras Claves: Metilfeoforbida a; fluorescencia; fotosensibilizador; entrecruzamiento de sistemas.

La comprensión de los procesos fotofísicos es fundamental para el diseño de nuevos fotosensibilizadores para su aplicación en diferentes procesos químicos como la terapia fotodinámica contra el cáncer, la fototransformación de contaminantes orgánicos, el diseño de sondas de fluorescencia y de fotosensibilizadores en celdas solares orgánicas. La metilfeoforbida a es un fotosensibilizador de segunda generación que cuenta con datos experimentales de rendimiento cuántico de producción de oxígeno singlete (0.62), constantes de velocidad de entrecruzamiento de sistemas (ISC) (79 x 10^6 s^{-1}) y fluorescencia (107 x 10^6 s^{-1}).

Para contribuir al diseño racional de fotosensibilizadores derivados de la metilfeoforbida a se estudiaron los procesos fotofísicos de absorción, entrecruzamiento de sistemas, fluorescencia y fosforescencia usando el planteamiento dependiente del tiempo descrito en los artículos [*J. Chem. Phys.* **2018**, *148* (3), 034104; *J. Chem. Theory Comput.* **2019**, *15* (3), 1896–1904]. Para seleccionar el mejor protocolo computacional para la predicción de propiedades fotofísicas evaluamos diferentes funcionales y parámetros para el cálculo de las velocidad de ISC y fluorescencia de la metilfeoforbida a.

Encontramos que dos de los tres primeros estados triplete ππ* son energéticamente accesibles desde el estado singlete S_1. La relajación desde S_1 hacia el estado fundamental procede principalmente vía fluorescencia. La constante de velocidad de fluorescencia calculada (261 x 10^6 s^{-1}) y la constante de velocidad de entrecruzamiento de sistemas (k_{isc}) son del mismo orden de magnitud que las reportadas experimentalmente. El canal más eficiente para el entrecruzamiento de sistemas es la transición $S_1(\pi\pi^*) \rightsquigarrow T_3(\pi\pi^*)$.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-207-P ***SUSCEPTIBILIDAD DEL PARÁSITO TRYPANOSOMA CRUZI FRENTE A MOLÉCULAS TIPO CARBENOS N-HETEROCÍCLICOS EMPLEANDO TÉCNICAS COMPUTACIONALES***

Susceptibilidad del Parásito *Trypanosoma cruzi* Frente a Moléculas Tipo Carbenos N-Heterocíclicos Empleando Técnicas Computacionales

Angie Melo-Marquez [a], Anny K. Rodríguez Fersaca [a] y Cristian Buendía-Atencio [a]*
[a] *Universidad Antonio Nariño, Semillero en Química Computacional, Facultad de Ciencias, Bogotá D. C., Colombia..*

*Autor de correspondencia: c.buendia@uan.edu.co

Palabras Claves: Enfermedad de Chagas; Tripanotión reductasa; Carbenos N-heterocíclicos; Acoplamiento Molecular; Inhibición enzimática.

El parásito *Trypanosoma cruzi* es responsable de la enfermedad de Chagas que predomina en zonas de escasos recursos limitando las investigaciones enfocadas al desarrollo de tratamientos no tóxicos para los pacientes en contraste con los fármacos actualmente usados tales como nifurtimox (NFX) y benznidazol (BZN) que presentan efectos adversos al ser administrados a largo plazo. Para buscar alternativas apropiadas en este trabajo se estudió la enzima Tripanotión reductasa (TR) presente en *T. cruzi* (PDB 1AOG) la cual tiene una importante función en la protección del parásito contra el estrés oxidativo, por lo que se realizó un estudio de acoplamiento molecular (Molecular docking) con compuestos de tipo N- heterocíclicos asociados con centros metálicos tipo oro (Au) y plata (Ag) [1, 2, 3]. Lo anterior con el fin de estudiar el sitio activo de la enzima y su susceptibilidad a partir de la estimación de energías de enlace bioinorgánico M-L (Metal-Ligando) en su función inhibitoria.

Los estudios de acoplamiento molecular entre la enzima TR frente a los compuestos N- heterocíclicos se realizaron con el programa Autodock Vina donde se implementan las cajas correspondientes y cuatro compuestos QMT3: Hexafluorofosfato de bis(1-alil-3metilbenzimidazolio)plata(I); QMT4: Hexafluorofosfato de bis(1-alil-3metilbenzimidazolio)oro(I); QMT7: Bromuro de bis(1,1´-(2,6-piridil)-3,3´-dimetildiimidazolio)diplata(I)); QMT8: Bromuro de (1,1´-(2,6-piridil)-3,3´-dimetildiimidazolio)dioro(I)) previamente seleccionados y optimizados al nivel semiempírico PM6 [4].

Nuestros resultados muestran que solo uno de ellos, QM3, presenta energías óptimas de -6.31, -6.71, -5.97, -6.37, -6.01, -5.69, -5.95, -5.71, -6.47 y -6.43 kcal/mol para las diez conformaciones encontradas respectivamente, al interactuar con el sitio activo de la enzima TR; en contraste los compuestos QMT4, 7 y 8 presentan interacción en otras regiones de la enzima, evidenciando la posibilidad de generar inhibición alostérica y demostrando el potencial de los compuestos N-heterocíclicos para interactuar e inhibir la función de enzimas importantes es la supervivencia de *T. cruzi*, siendo estas posibles alternativas terapéuticas.

Referencias bibliográficas

1. "Targeting Trypanothione Reductase, a Key Enzyme in the Redox Trypanosomatid Metabolism, to Develop New Drugs against Leishmaniasis and Trypanosomiases", Molecules, vol. 25, n.º 8, pp. 1924, abril de 2020.
2. "Trypanothione Reductase: A Target Protein for a Combined In Vitro and In Silico Screening Approach", PLOS Neglected Tropical Diseases, vol. 9, n.º 6, junio de 2015, art. n.º e0003773.
3. "Silver (I) N-Heterocyclic Carbene Complexes: A Winning and Broad Spectrum of Antimicrobial Properties", Int. J. Mol. Sci., vol. 22, n.º 5, pp. 2497, marzo de 2021.
4. "Remarkable in vitro anti-HIV activity of new silver(I)– and gold(I)–N-heterocyclic carbene complexes. Synthesis, DNA binding and biological evaluation", Polyhedron, vol. 110, p. 14–23, mayo de 2016.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-209-P ***ACOPLAMIENTO MOLECULAR DE POTENCIALES INHIBIDORES DE NIEMANN PICK C1, INVOLUCRADA EN LA TRANSMISIÓN DEL VIRUS DEL ÉBOLA***

Acoplamiento Molecular de Potenciales Inhibidores de Niemann Pick C1, Involucrada en la Transmisión del Virus del Ébola

Adolfo E. Ensuncho[a*], Jesús M. López[b,] y Yarelys P. Bravo[c]

[a] *Departamento de Química, Universidad de Córdoba, Colombia*

* *aensuncho@correo.unicordoba.edu.co*

Palabras claves: Acoplamiento molecular; ébola; Fármacos; inhibidores; Niemann pick C1.

Resumen

En este trabajo se diseñaron potenciales inhibidores de la transmisión del virus del Ébola mediante el análisis del sitio de unión de la proteína Niemann pick C1, por medio de acoplamiento molecular. Para esta investigación se hizo un estudio del sitio de unión de la proteína con el colesterol usando los programas protein plus y CASTp; seguido a esto se realizó la validación del método utilizando los softwares Ligplot + y USCF Chimera. Posteriormente, se tomaron moléculas de otras investigaciones para estudiar sus interacciones y con base a esto se diseñaron nuevas moléculas a las cuales se les aplicó acoplamiento molecular para poder escoger las moléculas con mejores energías de unión y finalmente a este seleccionado grupo se les realizó un estudio de las propiedades farmacocinéticas por medio de Swiss ADME. Las estructuras 18 (a) y 22(b) presentaron los mejores resultados en el radar de biodisponibilidad, ambas presentan una alta absorción gastrointestinal, cumplen con las reglas de Lipinski y sus valores están dentro de los parámetros establecidos, considerándose así estas moléculas con gran potencial como inhibidores del Virus del Ébola.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-210-P ***APLICACIÓN DE TÉCNICAS DE MACHINE LEARNING A LA CLASIFICACIÓN Y PREDICCIÓN DE MUTAGENICIDAD DE ACRILATOS***

Aplicación de Técnicas de Machine Learning a la Clasificación y Predicción de Mutagenicidad de Acrilatos

David A. Rincón[a,*] **y Markus Doerr**[a]

[a] *Grupo de Bioquímica Teórica, Universidad Industrial de Santander, Colombia*
[*] *Autor de correspondencia: davidalejandrorincon@outlook.com*

Palabras clave: Acrilatos; Mutagenicidad; Machine Learning; Predicción; Clasificación

Estamos expuestos a resinas tóxicas a base de acrilatos que aún no han sido debidamente identificadas como tales. Existe la necesidad de proponer métodos rápidos y efectivos para predecir e identificar su mutagenicidad. Utilizamos técnicas de machine learning como regresión logística, K-means y agrupamiento jerárquico para predecir la mutagenicidad del acrilato y clasificar un conjunto de 66 acrilatos descritos mediante 25 descriptores. Tres descriptores estructurales que incluyen el índice de estado electrotopológico de Kier y Hall y 22 descriptores mecánico-cuánticos como el potencial de ionización, HOMO, LUMO, y dureza, entre otros. Encontramos que los descriptores que están más correlacionados con la mutagenicidad son la electrofilicidad, la suavidad química y los descriptores relacionados con la densidad electrónica. El modelo QSAR obtenido tiene una precisión del 89 %, una especificidad del 100 %, una sensibilidad del 88 % y un coeficiente de correlación de Matthews de 0,71. Con este modelo predecimos dos nuevos acrilatos como mutagénicos.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-212-P REVIEWING THE VIBRATIONAL HALOCARBON GREENHOUSE GASES FROM DENSITY FUNCTIONAL THEORY CALCULATIONS

Reviewing the Vibrational Halocarbon Greenhouse Gases from Density Functional Theory Calculations

Gabriela Vargas-Becerra[aψ], Henry M. Ortíz[a], Vaneza P. Lorett Velásquez[b] and Cristian Buendía-Atencio[cψ]*

[a] Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Facultad de Ciencias y Educación, Bogotá D. C., Colombia
[b] Universidad Militar Nueva Granada, Facultad de Ciencias Biomédicas, Bogotá D. C., Colombia.
[c] Universidad Antonio Nariño, Facultad de Ciencias, Bogotá D. C., Colombia.
[ψ] Semillero de Investigación en Química Computacional - Universidad Antonio Nariño

*Corresponding author: c.buendia@uan.edu.co

Keywords: DFT; Greenhouse Gases; Halocarbon; Molecular vibrational frequencies; Spectroscopic properties

The greenhouse effect is a natural process carried out by the Earth in order to maintain the Earth's energy balance, this process is carried out by the well-known greenhouse gases which are extremely important, without these gases the absorption of electromagnetic radiation from the Sun, the re-emission and irradiation of electromagnetic radiation from the Earth would not be possible. These gases are characterized by absorbing solar radiation, mainly from the infrared region in the range of (295 - 1229 cm^{-1}), and once this IR radiation is absorbed, the atmospheric temperature increases [1-2].

Computational chemistry from Density Functional Theory (DFT) method, provides the properties for the fundamental state of a system calculated from the electronic density (ρ) predicting crucial molecular information such as thermochemical properties, vibrational frequencies, Mulliken charges, dipole moments, spatial coordinates, among others [3-4]. In this work the vibrational properties of the 59 halocarbon molecules were studied employing B3LYP, M06-2X, MP2, TPSS, PBE0 and MN15 functionals. The geometries at the minimum point are fully optimized by using the 6-311++G(*3df,3pd*) basis set. Analytical second order derivative methods were used for to estimated the harmonic vibration frequencies, and the assignment of the vibrational bands in the infrared spectrum was analyzed by employing a GaussView molecular visualization program, compared with the experimental data. The results obtained were comparable with 25 experimental date reported, the remaining 34 molecules do not have date reported in the literature. The scaling factor estimated with all DFT functionals are agree with the experimental data and the best value is 0.99 at the B3LYP/6-311++G(*3df,3pd*) level of theory. Additionally, computational data such as structural parameters, zero point energies, rotational constants and Mulliken charges are reported in this work. The revision of the vibrational frequencies confirms that the 34 molecules present absorption in the infrared on the atmospheric window within the range of 800-1200 cm^{-1}.

References

[1] Figueruelo, J. E. y Dávila, M. M. Química física del ambiente y de los procesos medioambientales, Editorial reverte, Barcelona y México, 2004.
[2] V. Lorett-Velásquez, J. A. Martínez-Bernal, G. P. Pieffet, C. Buendía-Atencio, ChemistrySelect 2019, 4, 14291.
[3] Andrés, J. y Beltrán, J. (eds): Química teórica y computacional, Publicaciones de la Universidad Jaume I, Castellón de la Plana, 2002.
[4] Nicolás Vázquez, M. I.; Marín Chiñas, E., Castro Martínez, F. M. y Miranda Ruvalcaba R., Algunos Aspectos Básicos de la Química Computacional. UNAM, México, 2006.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Velocidad de Oxidación y Evolución de Cristalinidad en Nanopartículas de Plata a Temperaturas Altas

Diego Chaparro [a], * Eirini Goudeli [a]
[a] *Department of Chemical Engineering, University of Melbourne, Melbourne, Australia*
* *Autor de correspondencia: dchaparrogut@student.unimelb.edu.au*

Palabras Claves: Plata; Nanotecnología; Dinámica Molecular Reactiva; Oxidación; Cristalinidad

Las nanopartículas de Plata es uno de los nanomateriales de mayor interés debido a su gran actividad antibacterial así como sus propiedades ópticas y catalíticas. De la literatura, es conocido que los iones de plata son los responsables de la actividad antibacterial pero su liberación se da por la interacción entre la capa de oxido formada en la superficie de la nanopartícula y las moléculas de agua. En la actualidad, la reactividad de este material con oxigeno ha sido escasamente estudiada y no se han explorado los aspectos cinéticos del proceso. En el presente trabajo se utilizan simulaciones de Dinámica Molecular (MD) para estudiar la oxidación de nanopartículas de plata a diferentes temperaturas y tamaños de partícula. Se obtuvieron resultados sobre la evolución de la cristalinidad, análisis de la composición y velocidad de oxidación. La Figura 1 muestra secciones transversales de una nanopartícula de plata durante múltiples ciclos de oxidación a diferentes temperaturas. Para un diámetro de 3 nm, es claro que la fase cristalina fcc que se concentra en los núcleos de las partículas se pierde más rápidamente a mayores temperaturas. En la Tabla 1 se presentan las energías de activación (Ea) para diferentes tamaños de partícula en el rango de 600-900 K obtenidas al usar el modelo de contracción y realizar una gráfica de Arrhenius. Las energías aumentan a mayor tamaño de partícula y son consistentes con el valor experimental de superficies de plata. De los resultados es claro que la oxidación ocurre de forma superficial, el tamaño de partícula y la temperatura de oxidación afectan la velocidad del proceso y la evolución de la cristalinidad.

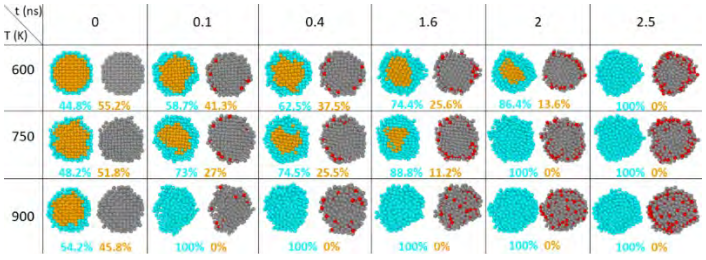


Figura 1: Secciones transversales de nanoparticulas de plata (3 nm) durante múltiples ciclos de oxidación. A la izquierda se presenta un código de color basado en cristalinidad (azul-fcc, amarillo-amorfo) mientras que a la derecha se usa un código de color basado en el tipo de átomo (Gris-Ag, Rojo-O). Figura adaptada de Chaparro y Goudeli (2023), J. Phys. Chem. C. 127 (27), 13389-13397

Tabla 1: Energias de activación para la oxidación de materiales de plata

Sistema y Método	Nanopartículas de Ag, MD				Ag, Exp
Tamaño (nm)	2	3	4	6	Macroscópico
Ea (kJ/mol)	21,9	22,3	24,3	27,5	33

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-257-P NOVEL IMIDAZOLIUM-BASED IONIC LIQUID/MORDENITE COMPOSITES FOR HYDROGEN CAPTURE AND STORAGE. AN ONIOM-DFT STUDY

Novel Imidazolium-Based Ionic Liquid/Mordenite composites for hydrogen capture and storage. An ONIOM-DFT study

Rodolfo Izquierdo [a*], **Néstor Cubillán** [b], **Rafael Zadorosny** [a]

a. *Universidade Estadual Paulista (UNESP), Faculdade de Engenharia, Departamento de Física e Química, Avenida Brasil, 56 – Centro, Zip Code 15385-000, Ilha Solteira – SP, Brazil.*

b. *Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad del Atlántico, Barranquilla, Colombia.*

** Corresponding Author: reis131182l@gmail.com*

Keywords: new materials, hydrogen storage, ionic liquid, mordenite, DFT, ONIOM

Abstract: In this paper, we demonstrated using ONIOM-DFT hybrid calculations the best way to synthesize new materials with applications in hydrogen storage technologies (HSTs). We focused on the formation mechanism of novel composites (*i.e.*, [M]-MOR) combining protonic mordenite (H-MOR) with various ionic liquids (*i.e.*, [M]Cl): 1,3-dimethyl-imidazolium chloride [MMIm]Cl, 1-ethyl-3-methyl-imidazolium chloride [EMIm]Cl; 1-methyl-3-propyl-imidazolium chloride [PMIm]Cl; 1-butyl-3-methyl-imidazolium chloride [BMIm]Cl, 1-(2-hydroxyethyl)-3-methyl-imidazolium chloride [HEMIm]Cl, and 1-(2-aminoethyl)-3-methyl-imidazolium chloride [AEMIm]Cl. The [EMIm]-MOR composites presented electronic and steric conditions for potential applications in HSTs (see Figure 1).

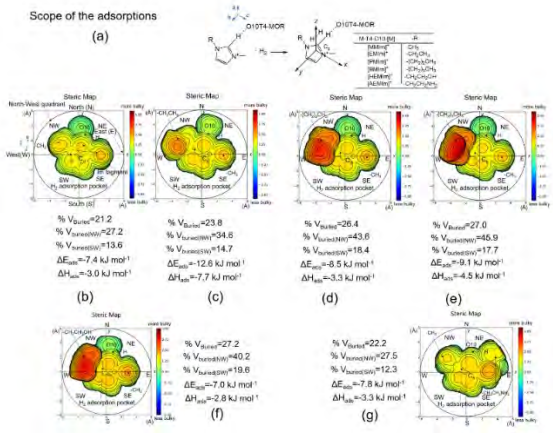


Figure 1. Scope of the H_2 adsorption and schematic representation of the adsorption *pocket* (adsorption site above gravity center of $[M]^+$ (C_8)) (a) and the corresponding steric maps for adsorptions of H_2 on [M]-MOR complex: MOR-T4-O10-[MMIm]-H_2 (b), MOR-T4-O10-[EMIm]-H_2 (c), MOR-T4-O10-[PMIm]-H_2 (d), MOR-T4-O10-[BMIm]-H_2 (e), MOR-T4-O10-[HEMIm]-H_2 (f), MOR-T4-O10-[AEMIm]-H_2 (g).

Acknowledgments: the authors thank UNESP for the financial support through Edital PROPe 13/2022 (UNESP-project: 4432), gridUNESP, and CAPES-finance code 001.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-270-P ***EVALUACIÓN IN SILICO DE LOS PARÁMETROS TERMODINÁMICOS DEL COMPLEJO ACTIVADO EN REACCIONES ION-MOLÉCULA Y MOLÉCULA-RADICAL EN EL MEDIO INTERESTELAR EN UN RANGO DE (20 A 300) K***

Evaluación *in silico* de los parámetros termodinámicos del complejo activado en reacciones ion-molécula y molécula-radical en el medio interestelar en un rango de (20 a 300) K

Yeison F. Rodríguez López [a]*, Eliseo amado-González

[a] *IBEAR, Universidad de pamplona, Colombia.*

* *Yeison Felipe Rodríguez López: yeison.rodriguez3@unipamplona.edu.co*

Palabras Claves: Reacción de gases; Complejo activado; Efecto estérico; DFT.

El enfoque de este trabajo investigativo se aplica a las reacciones presentes en nubes moleculares, ya que abundan especies dentro de estos sistemas. Es así, que pueden ocurrir distintas reacciones químicas en este medio. Sin embargo, debido al gran número de moléculas y a la gran variedad de posiciones y orientaciones que pueden adoptar, no todas las colisiones resultan en una reacción química. En el presente trabajo, Se utilizó una metodología que permitiera predecir de forma concreta el volumen molar y las energías de activación de los complejos (CH_4, CD_4, $C_2H_2Cl_2$, c-C_3H_2 y C_6F_6) y (SO, O_2^-, O_2 y OH) en formación. En este sentido, se aplicó la teoría del funcional de densidad (DFT), apoyada a la base de cálculo B3LYP, la cual permitió calcular de forma eficiente las propiedades termodinámicas de los sistemas moleculares en el software Gaussian 09. Adicionalmente, se empleó un método de cálculo más sofisticado, como la teoría del estado de transición, que propone un enfoque semiempírico de tipo DFT.

Una vez se obtuvo la energía de activación y los volúmenes molares, se calcularon los parámetros termodinámicos asociados al proceso mediante la teoría de colisión inducida por temperatura (TST), en el software Microsoft Excel. Se tuvo en cuenta el efecto de la temperatura en los coeficientes de velocidad de reacción y la distribución de energía cinética de los reactivos, para describir de forma precisa los efectos estéricos y termodinámicos que gobiernan el proceso químico.
A priori, se consiguió una descripción precisa del efecto estérico generado en la reacción de metano deuterado y el radical hidroxilo. Presentando una velocidad mínima de reacción y un incremento del efecto estérico debido a la repulsión entre los átomos de hidrógeno del metano y el grupo hidroxilo (OH).

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-291-P ***ESTUDIO IN SILICO DE LAS PROPIEDADES INTERFACIALES DE EMULSIONES W/O A BASE DE COMPONENTES LIPIDICOS DE THEOBROMA CACAO L.***

Estudio In Silico De Las Propiedades Interfaciales De Emulsiones W/O A Base De Componentes Lipidicos De *Theobroma cacao L.*

Luis G. Gómez-Martínez [a,d*], **Marianny Y. Combariza** [b,e], **Deisy G. Giraldo** [c,e], **Cristian Blanco-Tirado** [b,e] & **Aldo. F. Combariza** [a,b,e]

[a] *Departamento de Biología y Química, Facultad de Educación y Ciencias, Universidad de Sucre (UniSucre)*
[b] *Escuela de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Industrial de Santander (UIS)*
[c] *Institut des Sciences Analytiques et de Physico-chimie pour l'Environnement et les Matériaux, Université de Pau et des Pays de l'Adour*
[d] *Grupo de Investigación en Modelamiento Molecular y Simulación Computacional - IN SILICO, (UniSucre)*
[e] *Grupo de Investigación en Fisicoquímica Teórica y Experimental (GIFTEX), (UIS)*
* *Autor de Correspondencia: luis.gomez@unisucrevirtual.edu.co*

Palabras Claves: Emulsiones W/O; Dinámica Molecular; Propiedades Interfaciales; Tensión Interfacial; *Theobroma cacao L.*

Las emulsiones son una clase de mezcla semi-estable de dos líquidos inmiscibles que se logran mezclar con la ayuda de un agente emulsificante (por lo general mezclas de fosfolípidos (PLs) o proteínas), y que son indispensables para alterar las propiedades interfaciales en la emulsion [1]. Estos compuestos ayudan a reducir la energía requerida para generar una tensión superficial en la interfase de ambas fases, de está manera se estabiliza la mezcla y se evita el fenómeno de la coalescencia [2]. Dentro de la creciente industria, se viene llevando un proceso de bioeconomía que implica el uso de recursos naturales para la producción de productos novedosos, y teniendo en cuenta que la industria cacaotera está en aumento en Colombia, se requiere del estudio de los componentes que se producen naturalmente en está planta. Por está razón, en este trabajo se propuso estudiar las propiedades emulsificantes de fosfolípidos provenientes del Cacao (*Theobroma cacao L*) y su relación con los fenómenos interfaciales de una emulsion, con el apoyo de herramientas computacionales como la dinámica molecular (DM) que permiten explorar estas propiedades fisicoquímicas. Para el estudio de estos procesos, se llevó a cabo una simulación de DM por 50 ns con un sistema basado en una bicapa lipídica compuesto por los principales triglicéridos (POS, SOS y POP) y PLs provenientes del cacao (PC, PI, PE, PA, PG) aplicando el colectivo NPT con condiciones de 311 K y 1 bar, empleando el uso de la supercomputadora INKARI (UNSA, Perú). Los resultados obtenidos hasta el momento indicaron una reducción en la tensión interfacial (IFT) partiendo de un valor de ~19 mN/m (Sistema agua-aceite sin surfactante) hasta un valor final de 3.03 mN/m, lo cual se corrobora en la literatura [3]. Además, los análisis de HBL calculados de manera teórica, y correlacionando con el RDF de los grupos polares de los PLs indicaron que la mezcla de PLs (lecitina de cacao) se encuentra dentro del rango de emulsificantes W/O, con un valor teórico calculado de 5.91. En adición, algunos análisis como RMSD, SASA, RDF, Radio de Giro, entre otros, mostraron estabilidad de los PLs y entre la interfase aceite-agua a lo largo de la simulación.

Referencias

[1] Yamashita, Y.; Miyahara, R.; Sakamoto, K. Emulsion and Emulsification Technology. In Cosmetic Science and Technology; Elsevier, 2017; pp 489–506.
[2] Tan, C.; McClements, D. J. Application of Advanced Emulsion Technology in the Food Industry: A Review and Critical Evaluation. Foods 2021, 10 (4), 812.
[3] Ushikubo, F. Y.; Cunha, R. L. Stability Mechanisms of Liquid Water-in-Oil Emulsions. Food Hydrocolloids 2014, 34, 145–153.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-301-P ***ESTUDIO COMPUTACIONAL Y TERMODINÁMICO DEL EQUILIBRIO LÍQUIDO-VAPOR PARA EL SISTEMA BINARIO Y TERNARIO CON CLOROFORMO, ACETONA Y BENCENO A 101,33 KPA.***

Estudio computacional y termodinámico del equilibrio líquido-vapor para el sistema binario y ternario con cloroformo, acetona y benceno a 101,33 kPa.

Leonardo S. Reyes-Fernández[a*], Elíseo Amado-Gonzalez
[a] *IBEAR, Universidad de Pamplona, Colombia*
* *Autor de correspondencia:* leonardo.reyes@unipamplona.edu.co

Palabras Claves: Equilibrio líquido-vapor; DFT, NRTL; Wilson; UNIQUAC.

El desafío actual en la industria radica en obtener datos precisos sobre equilibrios de fases en procesos de separación. Muchas publicaciones antiguas no evaluadas contribuyen a la incertidumbre en este campo. En esta investigación, se determinaron los equilibrios líquido-vapor (ELV) para soluciones acuosas de tres sistemas binarios: Cloroformo(1) + Benceno(2), Cloroformo(1) + Metanol(2) y Metanol(1) + Benceno(2), además del sistema ternario Cloroformo(1) + Metanol(2) + Benceno(3), a 101.33 kPa. Los datos de ELV se obtuvieron de bases de datos accesibles, como el Dortmund Data Bank (DDB) y el Korean Data Bank (KDB), y pasaron las pruebas de consistencia termodinámica, específicamente la prueba de áreas de Herington (para sistemas binarios) y la prueba punto a punto de Wisniak (para sistemas ternarios).Los datos recopilados se correlacionaron mediante diversos modelos de coeficientes de actividad, como el modelo de dos líquidos no aleatorios (NRTL), Wilson y los modelos químicos cuasiuniversales (UNIQUAC), con el propósito de ajustar con precisión los diagramas binarios (P-x-y) y (T-x-y), así como el diagrama de composición ternario. Se utilizaron los parámetros del modelo de Wilson obtenidos del sistema binario para predecir los datos ternarios de ELV. En dicho modelo, se encontró la desviación promedio de temperatura más baja (ADDT) con un valor de 0.5849 Ver figura. Por otra parte, se aplicó el método DFT (B3LYP) para evaluar las interacciones moleculares entre los componentes en estudio y para calcular las energías de interacción. Este proceso involucró la optimización geométrica de cada componente neutro, realizada en un entorno aislado en fase gaseosa utilizando el paquete de programas Gaussian y basándose en el conjunto de bases 6-311G (d,p). Las energías de interacción se calcularon ajustando por el error de superposición de bases (BSSE) mediante el método Boys-Bernardi, El resultado indicaba que las energías de interacción (ΔE) siguiendo el orden ΔE(cloroformo+ benceno) > ΔE(Cloroformo+ metanol) > ΔE(metanol benceno) , siendo el cloroformo el que tiene mayor afinidad electrónica interna con los otros compuestos, dándole estabilidad al complejo ternario.

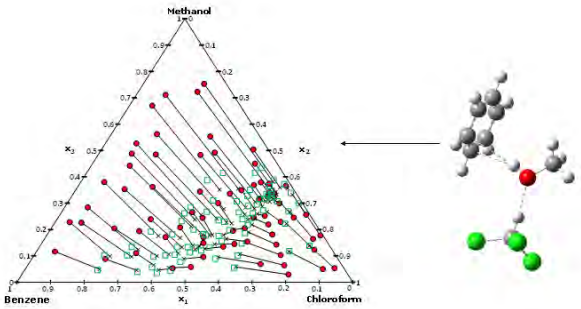


Figura. Diagrama de VLE para el sistema ternario Cloroformo(1) + Metanol(2) + Benceno(3) a presión atmosférica

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-317-P ***DISEÑO DE MOLÉCULAS ANÁLOGAS DE FLAVONOIDES AISLADOS DE PLANTAS COLOMBIANAS CON POTENCIAL APLICACIÓN FARMACÉUTICA EN EL TRATAMIENTO DE LA DIABETES***

Diseño de Moléculas Análogas de Flavonoides Aislados de Plantas Colombianas con Potencial Aplicación Farmacéutica en el Tratamiento de la Diabetes

Sergio A. Quintana [a], Luisa M. Sandoval [a,b], Tania M. Pacheco [a], Carlos A. Arango [a,*]

[a] *Departamento de Ciencias Farmacéuticas y Químicas, Universidad Icesi, Colombia*

[b] *Departament of Chemistry, Purdue University, USA*

[*] caarango@icesi.edu.co

Palabras Claves: α-glucosidasa; diabetes; IC_{50}; acoplamiento molecular; dinámica molecular.

La diabetes es una enfermedad metabólica crónica que perturba los niveles de glucosa en la sangre. Existen dos variantes principales de diabetes: tipo I, que surge debido a la insuficiencia de insulina producida por el páncreas, y tipo II, la cual prevalece y se caracteriza por la resistencia del cuerpo a la insulina. La ralentización de la absorción de glucosa después de las comidas se revela como un enfoque crucial para abordar y prevenir la diabetes tipo II. Aquí, emerge la enzima α-glucosidasa como blanco terapéutico, ya que interviene con la descomposición de los azúcares.

Mientras el tratamiento convencional de la diabetes se basa en secretagogos e incrementadores de la sensibilidad a la insulina, se vislumbra la promesa de los inhibidores enzimáticos, como los dirigidos a la α-glucosidasa, como alternativas menos invasivas y eficaces. Aunque ya existen dichos inhibidores, algunos presentan efectos secundarios gastrointestinales presentando así la necesidad de desarrollar nuevas opciones terapéuticas.

Dentro de estas nuevas alternativas, se destaca el potencial terapéutico de las plantas por el amplio espectro de moléculas biológicamente activas que estas ofrecen. Colombia, con su biodiversidad, emerge como un terreno fértil para la producción y desarrollo de medicamentos. El potencial de los productos naturales, incluido los flavonoles, como inhibidores de α-glucosidasa, se ha reportado en varios estudios. Sin embargo, los estudios de relación estructura molecular-actividad inhibitoria al respecto son pocos y existen muchos vacíos acerca de las características estructurales claves de estas moléculas para dicha actividad.

En este proyecto, se emplearon métodos computaciones de acoplamiento y dinámica molecular para modelar la interacción entre flavonoles y enzima, calculado la energía libre de unión de los complejos resultantes. Al correlacionar esta energía con los valores de IC_{50} y analizar la estructura de los complejos, se obtiene una comprensión detallada del modo en que los flavonoles inhiben. Esta información guía el diseño de análogos estructurales que formen complejos más estables con las enzimas, potenciando la actividad inhibitoria.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-318-P ***IDENTIFICACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE LOS SITIOS DE UNIÓN DEL COLESTEROL DE MEMBRANA EN EL RECEPTOR CB1 MEDIANTE DINÁMICA MOLECULAR.***

Identificación y Caracterización de los Sitios de Unión del Colesterol de Membrana en el Receptor CB_1 mediante Dinámica Molecular.

Manuela Jaramillo Vanegas[a*], **Gian Pietro Miscione**[a]

Departamento de Química, Universidad de los Andes, Bogotá Colombia

**Autor de correspondencia*: m.jaramillov2@uniandes.edu.co

Palabras claves: receptor CB_1; colesterol; membrana; dinámica molecular.

El receptor cannabinoide de tipo 1 (CB_1) es un receptor transmembranal acoplado a las proteínas G (GPCR). Es el receptor más abundante del sistema nervioso central[1], y también se localiza en áreas periféricas, por lo que se encuentra involucrado en procesos como regulación del dolor, el apetito, la memoria, el estado de ánimo, la recompensa y otros procesos fisiológicos[2]. Se ha encontrado que el colesterol, que es un componente natural de las membranas que puede modificar su actividad, por tal motivo, es considerado un modulador alostérico endógeno[1]. Los sitios de unión del colesterol que se han identificado son bastante diversos entre los diferentes GPCR. En el caso del CB1 se han dos sitios de interés: por un lado se se sugiere un sitio de reconocimiento de colesterol en la helice TM7[3,4], y por otro lado, se cuenta con información cristalográfica (entre los que se tiene el cristal 5XR8 y el 5XRA) que evidencia la unión del colesterol al receptor, entre las helices TM2, TM3, y TM4[1]. El estudio de la dinámica de interacción del receptor CB_1 con el colesterol podría permitir la caracterización de los sitios ya reportados y la identificación de otros sitios potenciales. En nuestro estudio empleamos dinámica molecular de un sistema compuesto por una membrana estándar de POPC:CHL en relación 5:1 y el receptor CB_1 tomado del cristal 5XR8, con el fin de estudiar los tiempos de residencia del colesterol en diferentes regiones del sistema, definir los sitios de unión e investigar las interacciones responsables de la estabilización del colesterol en tales sitios.

Referencias

1. Brust, C. A.; Swanson, M. A.; Bohn, L. M. Structural and functional insights into the G protein-coupled receptors: CB1 and CB2. Biochem. Soc. Trans. 2023, 51 (4), 1533-1543.

2. Alexander, S. P. H. Cannabinoid Receptors. xPharm Compr. Pharmacol. Ref. 2007, 1–3.

3. Oddi, S.; Dainese, E.; Fezza, F.; Lanuti, M.; Barcaroli, D.; De Laurenzi, V.; Centonze, D.; Maccarrone, M. Functional Characterization of Putative Cholesterol Binding Sequence (CRAC) in Human Type-1 Cannabinoid Receptor. J. Neurochem. 2011, 116 (5), 858–865.

4. Di Scala, C.; Fantini, J.; Yahi, N.; Barrantes, F. J.; Chahinian, H. Anandamide Revisited: How Cholesterol and Ceramides Control Receptor-Dependent and Receptor-Independent Signal Transmission Pathways of a Lipid Neurotransmitter. Biomolecules 2018, 8 (2)

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-319-P ***DISEÑO DE MOLÉCULAS ANÁLOGAS DE FLAVONOIDES AISLADOS DE PLANTAS COLOMBIANAS CON POTENCIAL APLICACIÓN FARMACÉUTICA EN EL TRATAMIENTO DE LA DIABETES***

Diseño de Moléculas Análogas de Flavonoides Aislados de Plantas Colombianas con Potencial Aplicación Farmacéutica en el Tratamiento de la Diabetes

Sergio A. Quintana [a], Luisa M. Sandoval [a,b], Tania M. Pacheco [a], Carlos A. Arango [a,*]

[a] *Departamento de Ciencias Farmacéuticas y Químicas, Universidad Icesi, Colombia*
[b] *Departament of Chemistry, Purdue University, USA*

[*]caarango@icesi.edu.co

Palabras Claves: α-glucosidasa; diabetes; IC_{50}; acoplamiento molecular; dinámica molecular.

La diabetes es una enfermedad metabólica crónica que perturba los niveles de glucosa en la sangre. Existen dos variantes principales de diabetes: tipo I, que surge debido a la insuficiencia de insulina producida por el páncreas, y tipo II, la cual prevalece y se caracteriza por la resistencia del cuerpo a la insulina. La ralentización de la absorción de glucosa después de las comidas se revela como un enfoque crucial para abordar y prevenir la diabetes tipo II. Aquí, emerge la enzima α-glucosidasa como blanco terapéutico, ya que interviene con la descomposición de los azúcares.

Mientras el tratamiento convencional de la diabetes se basa en secretagogos e incrementadores de la sensibilidad a la insulina, se vislumbra la promesa de los inhibidores enzimáticos, como los dirigidos a la α-glucosidasa, como alternativas menos invasivas y eficaces. Aunque ya existen dichos inhibidores, algunos presentan efectos secundarios gastrointestinales presentando así la necesidad de desarrollar nuevas opciones terapéuticas.

Dentro de estas nuevas alternativas, se destaca el potencial terapéutico de las plantas por el amplio espectro de moléculas biológicamente activas que estas ofrecen. Colombia, con su biodiversidad, emerge como un terreno fértil para la producción y desarrollo de medicamentos. El potencial de los productos naturales, incluido los flavonoles, como inhibidores de α-glucosidasa, se ha reportado en varios estudios. Sin embargo, los estudios de relación estructura molecular-actividad inhibitoria al respecto son pocos y existen muchos vacíos acerca de las características estructurales claves de estas moléculas para dicha actividad.

En este proyecto, se emplearon métodos computaciones de acoplamiento y dinámica molecular para modelar la interacción entre flavonoles y enzima, calculado la energía libre de unión de los complejos resultantes. Al correlacionar esta energía con los valores de IC_{50} y analizar la estructura de los complejos, se obtiene una comprensión detallada del modo en que los flavonoles inhiben. Esta información guía el diseño de análogos estructurales que formen complejos más estables con las enzimas, potenciando la actividad inhibitoria.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-340-P ***INCORPORACIÓN DEL CAMPO MAGNÉTICO EN EL ALGORITMO VELOCITY VERLET EN EL PAQUETE GROMACS***

Incorporación del Campo Magnético en el Algoritmo Velocity Verlet en el paquete GROMACS

Diego F. Nieto[a,b,*], **Javier I. Torres-Osorio**[a], **José M. Rodas**[b],

[a] *Grupo de investigación en magnetobiología, Universidad de Caldas, Colombia.*
[b] *Grupo de investigación en Química Teórica y Bioinformática, Universidad de Caldas, Colombia.*
** Autor de correspondencia: diego.nieto@ucaldas.edu.co*

Palabras clave: Dinámica molecular, densidad de flujo magnético, magnetobiología, estudio *in silico*

La magnetobiología es un área de creciente interés, debido a que se han presentado avances importantes en áreas como la biotecnología, la medicina y la agricultura, como es el caso del tratamiento magnético de semillas. Contrario a la creencia tradicional, se ha acumulado evidencia experimental del efecto de los campos magnéticos sobre los seres vivos, sin embargo, aún no es claro mental de observar dicho fenómeno a este nivel, la química computacional emerge como una alternativa importante para dar explicación desde el punto de vista teórico. Para lograr esto, es necesario llevar a cabo cálculos de dinámica molecular en los que se tenga en cuenta el efecto de un campo magnético externo. Debido a lo anterior, en este trabajo se presenta una modificación del algoritmo Velocity Verlet implementado en el paquete GROMACS, en la que se incorpora la frecuencia de Larmor al algoritmo en cuestión. Con esta modificación se tiene en cuenta el efecto del campo magnético en la actualización de posiciones y velocidades de cada partícula en cada paso de la simulación. Posteriormente, el software modificado se validó por medio del estudio de la evolución temporal de un sistema compuesto por un ion sodio y uno compuesto por un ion cloruro. Ambos iones presentan una trayectoria helicoidal en la que el radio de la trayectoria varía de forma inversamente proporcional a la densidad de flujo magnético. La principal diferencia entre ambos iones es que siguen direcciones opuestas en la trayectoria helicoidal. El comportamiento descrito por los iones se ajusta a lo esperado. En conclusión, la modificación al paquete *GROMACS* es apropiada para llevar a cabo dinámicas moleculares bajo el efecto del campo magnético, lo que abre la puerta a simulaciones que permitan tener un mejor entendimiento a nivel molecular del efecto de dichos campos en sistemas biológicos.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-342-P ***DISEÑO IN SILICO Y ESTUDIOS PRELIMINARES DE SÍNTESIS DE ANÁLOGOS DE BENCIMIDAZOL CON POTENCIAL ACTIVIDAD ANTILEISHMANIAL.***

Diseño *In Silico* y Estudios Preliminares de Síntesis de Análogos de Bencimidazol con Potencial Actividad Antileishmanial.

Alan, S. Castrillón [a], Cristian, D. Casallas [a], Evelyn, D. Maldonado [a*],

Jhon, A. González [a], Diana, M. Vargas [a]

[a] *PRONASI (Semillero de Investigación en Aplicaciones de Productos Orgánicos Sintéticos), Universidad El Bosque, Colombia.*

**Autor de correspondencia: emaldonadoa@unbosque.edu.co*

Palabras clave: Arginasa; Diseño *in silico;* Leishmaniasis; Leishmanolisina; Tubulina.

La leishmaniasis es una enfermedad desatendida presente en más de 90 países alrededor del mundo, por lo cual la OMS la clasifica como un problema de salud pública de especial interés, por su presencia en países tropicales y subtropicales con altos índices de pobreza[1]. Esta es una enfermedad parasitaria que causa deformidades cutáneas o daño visceral en quien la presenta[2], actualmente los tratamientos son poco efectivos y altamente tóxicos[3]. Por esto, se plantea el diseño de moléculas derivadas de bencimidazoles, por su actividad inhibitoria para diferentes blancos terapéuticos: la proteína leishmanolisina (GP63), encargada del ingreso del microorganismo al macrófago huésped[4]; la tubulina, esencial para la formación de microtúbulos que desempeñan un papel clave en el crecimiento y proliferación del protozoo[3]; y, la arginasa, enzima importante para la replicación del protozoario y el crecimiento celular[5]. Con estos blancos farmacológicos, el objetivo es realizar un diseño *in silico* de moléculas derivadas de bencimidazol, con características polifarmacológicas[6] para hacer una posterior evaluación del perfil inhibitorio, utilizando programas especializados: Avogadro, Autodock Vina, y Discovery Studio® para el acoplamiento molecular; RMN, espectroscopia de masas y espectroscopia IR para la elucidación estructural y PreADMET para la evaluación de la toxicidad. Es así como, se diseñaron 180 moléculas con modificaciones en los sustituyentes 1, 2, 5 y 6 del bencimidazol, evidenciando mayor afinidad hacia los blancos terapéuticos por parte de dos moléculas, con valores de afinidad de -7,9 y -8,6, -10,0 y -7,9, -8,6 y -9,7 (kcal/mol) para las proteínas tubulina, arginasa y GP63 respectivamente, aumentando la afinidad de las moléculas entre 1,4 y 4,0 unidades frente a las moléculas reportadas. Se concluye que, hasta el momento, se logró el diseño de dos moléculas derivadas de bencimidazol con mejores características computacionales que las reportadas actualmente en la literatura, además, presentan buenos resultados de inhibición frente a varias dianas biológicas que podrían ayudar a mitigar la leishmaniasis a partir de la polifarmacología. Ahora, se espera lograr la síntesis de los compuestos para posteriores estudios *in vitro*, donde el primer paso de reacción es un reto debido a los isómeros que pueden conformarse en la obtención del sustituyente adecuado.

Referencias

[1] "Leishmaniasis" [Internet]. OPS/OMS | Organización Panamericana de la Salud [citado 07 mayo 2022]. Disponible en: https://www.paho.org/es/temas/leishmaniasis

[2] Organización Panamericana de la Salud. "Manual de procedimientos para vigilancia y control de las leishmaniasis en las Américas." Washington, D.C.: OPS, 2019.

[3] J. C. Sánchez, P. Bilbao, M. A. Dea, F. Hernandez, F. Bolás, J. S. Medina, and Y. Rojas, "Systematic search for benzimidazole compounds and derivatives with antileishmanial effects" Mol. Divers., vol. 22, no. 4, pp. 779–790, 2018, doi: 10.1007/S11030-018-9830-7.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

[4] A. Shaukat, H. M. Mirza, A. H. Ansari, M. Yasinzai, S. Z. Zaidi, S. Dilshad, and F. L. Ansari,"Benzimidazole derivatives: synthesis, leishmanicidal effectiveness, and molecular docking studies" Med. Chem. Res. vol. 22, no. 8, pp. 3606–3620, 2012, doi: 10.1007/S00044-012-0375-5.

[5] I. Betancourt-Conde et al., "Benzimidazole derivatives as new and selective inhibitors of arginase from leishmania mexicana with biological activity against promastigotes and amastigotes," Int. J. Mol. Sci., vol. 22, no. 24, 2021, doi: 10.3390/ijms222413613.

[6] G. Rastelli and L. Pinzi, "Computational polypharmacology comes of age," Frontiers in Pharmacology, vol. 6, 2015, doi: 10.3389/fphar.2015.00157

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-344-P ***PREDICCIÓN DE LA COMPOSICIÓN SARA DEL PETRÓLEO EMPLEANDO FTIR-ATR Y MÉTODOS DE MACHINE LEARNING***

Predicción de la Composición SARA del Petróleo Empleando FTIR-ATR y Métodos de *Machine Learning*

Evelyn J Calderón [a*], **Enrique Mejía** [b], **Eugenio Jaramillo** [c]

[a, b] *Laboratorio de Espectroscopia Atómica y Molecular, Universidad Industrial de Santander, Colombia*
[c] *Laboratorio de hidrocarburos, PSL Proanalisis S.A.S. Bic, Colombia*
*: *evelyn2228059@correo.uis.edu.co*

Palabras Claves: SARA; Petróleo; Machine Learning; FTIR-ATR.

Los métodos convencionales para determinar la composición de las fracciones de Saturados, Aromáticos, Resinas y Asfaltenos (SARA) de petróleo requieren de alto consumo de tiempo, son costosos y no son amigables con el medio ambiente, por tal razón el objetivo de este trabajo es desarrollar modelos cuantitativos y rápidos para calcular el parámetro de composición mencionada. Para ello se recolectaron 60 muestras de petróleo de diferentes zonas, las cuales fueron analizadas por espectroscopía de infrarrojo por transformada de Fourier (FTIR, por sus siglas en inglés**)** en modo de Reflectancia Total Atenuada (ATR, por sus siglas en inglés). El análisis SARA se ejecutó en paralelo utilizando el método indicado por la Sociedad Estadounidense para Pruebas y Materiales (ASTM, por sus siglas en inglés) (D-2007 y D-2549). La información espectral y los valores de las fracciones del petróleo se emplearon como conjunto de variables predictoras y conjunto de variables respuesta, respectivamente. Los métodos empleados fueron Gradient Boosting (GB), Support Vector Machine Regression (SVM-R) y Partial Least Squares Regression (PLS-R). Se obtuvo un coeficiente de correlación de predicción (R^2) de 0.78 y un error cuadrático medio (RMSE) de 8.26 empleando el método de Gradient Boosting para la predicción de asfaltenos**,** lo que podría resultar un método adecuado para la determinación cuantitativa del análisis SARA de muestras de petróleo.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-389-P ANÁLISIS METABOLÓMICO DE PSEUDELEPHANTOPUS SPICATUS Y CRIBADO VIRTUAL INVERSO PARA LA BÚSQUEDA DE BLANCOS FARMACOLÓGICOS

Análisis Metabolómico de *Pseudelephantopus spicatus* y Cribado Virtual Inverso para la Búsqueda de Blancos Farmacológicos

Laura Parra Carrillo [a], Laura Polania Varón [b], Luis Bernal [a], Jorge Anaya Gil [c], Elkin Tilvez [a]*

[a]*Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de la Amazonia, Colombia*
[b]*Programa de Doctorado en Fisicoquímica Molecular, Fac. de Ciencias Exactas, Universidad Andrés Bello, Chile*
[c]*Programa de Química Farmacéutica, Facultad de Ciencias Farmacéuticas, Universidad Cartagena*, Colombia
** Autor de correspondencia: e.tilvez@udla.edu.co*

Palabras Claves: *Pseudodelephantopus spicatus*; Metabolitos secundarios; Reverse Virtual Screening; Blanco farmacológico.

La especie vegetal *Pseudelephantopus spicatus* ha sido valorada tradicionalmente por sus propiedades medicinales como analgésico, antiinflamatorio, antiofídico, entre otras. Sin embargo, la literatura que respalda estas propiedades es limitada. En este estudio, relacionamos los metabolitos secundarios de *P. spicatus* recolectada en la Amazonía colombiana con posibles blancos terapéuticos a través de un enfoque multidisciplinario que combina la química y la bioinformática. Para esto, se realizó la extracción metanólica de las hojas de *P. spicatus* y se analizó mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS), logrando identificar 31 metabolitos secundarios.

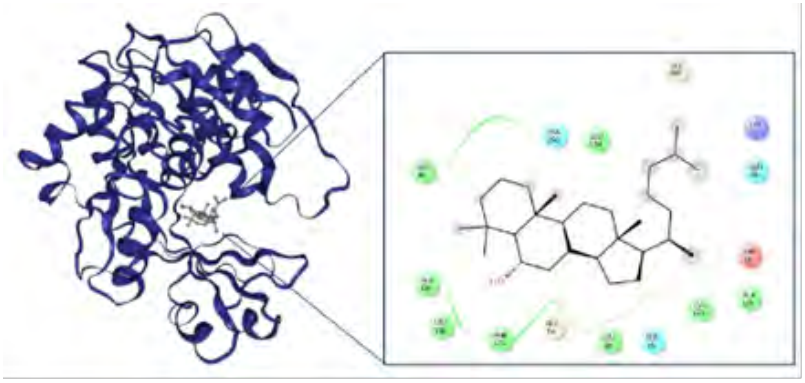


Figura 1. Representación del acoplamiento molecular del metabolito 4,4-dimetil-colesta-22,24-dien-5-ol con la proteína Humana Adenosina Quinasa (HAK, código PDB 2I6B),

Para la búsqueda de los posibles blancos farmacológicos empleamos la técnica de cribado virtual inverso. Inicialmente, se obtuvo las estructuras de los 31 ligandos de la base de datos *PubChem*, y a través del servidor *PharmMapper* se identificaron blancos potenciales a través del mapeo de los farmacóforos de los ligandos. Los resultados se presentaron como códigos PDB. Posteriormente, se filtraron los PDB candidatos cuya inhibición conduce a una actividad farmacológica, identificando 29 proteínas potenciales. Finalmente, se realizaron estudios de acoplamiento molecular empleando el programa AutoDock Vina, implementado en el servidor web CB-DOCK2. Estos estudios permitieron identificar la afinidad de los ligandos por las proteínas blanco (Figura 1). En conjunto, nuestros resultados resaltan la riqueza química de *Pseudodelephantopus spicatus* y brindan una visión prometedora sobre las posibles aplicaciones terapéuticas de esta especie vegetal, así como de los mecanismos asociados a su uso en medicina tradicional.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-393-P ***FITOCANNABINOIDES: DESCIFRANDO SU RELACIÓN CON TARGETS Y ENFERMEDADES MEDIANTE FARMACOLOGÍA DE REDES***

Fitocannabinoides: Descifrando su Relación con Targets y Enfermedades mediante Farmacología de Redes

Claudia Martínez-García [a], Ignacio Valenzuela-Martinez [a], Paola Borrego-Muñoz [b], Luis M. Pombo [b], Luis G. Piñeros [b], Claudia C. Delgado [b], Janneth González [c], David Ramírez [a,*]

[a] *Departamento de Farmacología, Facultad de Ciencias Biológicas, Universidad de Concepción, Chile*
[b] *Fundación Universitaria Juan N. Corpas, Colombia*
[c] *Departamento de Nutrición y Bioquímica, Pontificia Universidad Javeriana, Colombia*
** Autor de correspondencia: dramirez@udec.cl*

Palabras Claves: farmacología de redes; fitocannabinoides; polifarmacología; *Cannabis sativa*.

Cannabis sativa contiene más de 140 fitocannabinoides, muchos de estos cannabinoides modulan receptores, canales ionotrópicos y enzimas (entre otras proteínas), y muestran potencial terapéutico de forma individual o sinérgica con otros fitocannabinoides. El propósito de este trabajo es realizar un análisis farmacológico basado en redes, lo que contribuye a una comprensión más profunda de las enfermedades, las vías de señalización, las proteínas y los genes humanos asociados a los fitocannabinoides presentes en *Cannabis sativa*.

Para lograrlo, se realizó una búsqueda en la literatura científica sobre los fitocannabinoides reportados en *Cannabis sativa*. Se empleó la base de datos CHEMBL33 (mayo 2023) para encontrar los targets relacionados con los fitocannabinoides y se filtraron los targets para obtener solo aquellos de *Homo sapiens* que tuvieran un valor de actividad biológica reportado. Las interacciones proteína-proteína se obtuvieron mediante la base de datos de STRING. Posteriormente, se empleó la base de datos Open Targets para obtener la asociación proteína-enfermedad. La visualización de la red se realizó en Cytoscape (3.9.1) y Arena3D web. Para predecir los procesos biológicos enumerados en el sistema de clasificación Gene Ontology (GO) se empleó Enrichr y ShinyGo 0.77. Finalmente, los clústeres o módulos funcionales se obtuvieron utilizando el software MTGO.

Los resultados obtenidos muestran que de los 49 fitocannabinoides encontrados en literatura, 13 tienen targets reportados. Se seleccionaron 24 targets frente a esos fitocannabinoides y se estableció una conexión con diversas enfermedades, incluyendo varios tipos de cáncer, enfermedades neurodegenerativas como Alzhéimer y Párkinson, así como condiciones como el asma aguda, entre otras. Además, del análisis de módulos funcionales de procesos biológicos con MTGO, resultaron 23 módulos, en donde se destacan procesos relacionados al metabolismo, la señalización celular y la respuesta inmune.

En resumen, este estudio aporta una visión integral desde la perspectiva de la farmacología de sistemas de como los fitocannabinoides modulan diferentes sistemas en el organismo humano, revelando posibles aplicaciones terapéuticas en una amplia gama de enfermedades. Este conocimiento es de vital importancia, ya que proporciona una base sólida para futuras investigaciones y desarrollo de terapias más efectivas.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

Evaluación Computacional de la Adsorción de Ácido Aminometilfosfónico en grafeno y grafeno dopado con metales de transición

Elkin Tilvez Marrugo [a*], **Dumer Sacanamboy Papamija** [b]

[a]*Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de la Amazonia, Colombia*
[b]*Programa de Doctorado en Fisicoquímica Molecular, Fac. de Ciencias Exactas, Universidad Andrés Bello, Chile*

** Autor de correspondencia: e.tilvez@udla.edu.co*

Palabras Claves: Ácido aminometilfosfónico; Grafeno; Metales de transición; Adsorción; DFT.

El ácido aminometilfosfónico (AMPA) es uno de los productos de degradación del herbicida glifosato. El AMPA tiene una vida media más larga que su precursor, lo que representa un riesgo para el medio ambiente y la salud humana. La eliminación de estos contaminantes se ha convertido en un importante reto científico. Nanomateriales como el grafeno, con sitios superficiales activos, han demostrado una alta eficiencia en la eliminación de una amplia gama de contaminantes

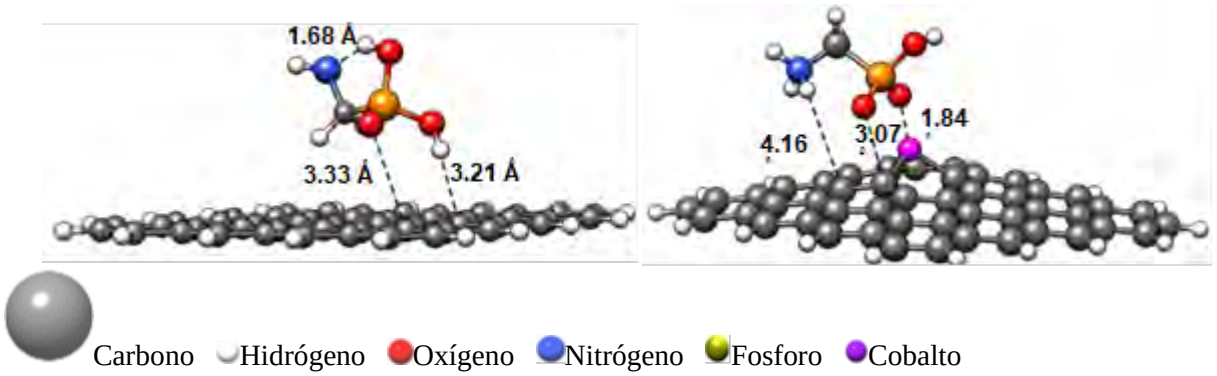


Figura 1: Geometrías optimizadas de los mínimos encontrados para la interacción de molécula del AMPA sobre la nanolámina de grafeno prístino y dopado en disolución acuosa.

En este estudio, evaluamos la capacidad de adsorción de AMPA sobre grafeno prístino y grafeno dopado con metales Fe, Ni y Co. Se realizaron cálculos de Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) utilizando el funcional de intercambio-correlación PBE, el conjunto de bases def2-SVP para los átomos de carbono e hidrógeno, y el pseudopotencial lanl2dz para los metales de transición. Se evaluaron las propiedades energéticas y termodinámicas, así como la naturaleza de las interacciones intermoleculares usando QTAIM. Los resultados obtenidos muestran que el grafeno prístino presenta una energía de adsorción que oscila entre -26,336 kcal/mol y -20,707 kcal/mol, lo que indica una interacción favorable con el AMPA. Sin embargo, el dopaje del grafeno produjo un aumento de la adsorción, mostrando el sistema dopado con Co la mayor energía de adsorción de -60,598 kcal/mol, seguido por el hierro y el níquel con -58,245 kcal/mol y -51,625 kcal/mol, respectivamente. Los valores positivos de $H\rho_{BCP}$ y $\nabla^2\rho_{BCP}$, junto con el análisis de las interacciones no covalentes, indican que la naturaleza de las interacciones es la fisisorción.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-405-P CARACTERIZACIÓN DEL FLUJO DE AGUA A TRAVÉS DE ACUAPORINAS TIP3;1 DE SEMILLAS DE MAÍZ POR DINÁMICA MOLECULAR

Caracterización del Flujo de Agua a Través de Acuaporinas TIP3;1 de Semillas de Maíz por Dinámica Molecular

Diego F. Nieto[a,b,*], Javier I. Torres-Osorio[a], José M. Rodas[b],

[a] *Grupo de investigación en magnetobiología, Universidad de Caldas, Colombia.*
[b] *Grupo de investigación en Química Teórica y Bioinformática, Universidad de Caldas, Colombia.*
* *Autor de correspondencia: diego.nieto@ucaldas.edu.co*

Palabras clave: Canales de membrana, permeabilidad osmótica, enlaces de hidrógeno, perfil de poro, *Zea mays* L.

El transporte de agua a través de las membranas celulares es uno de los fenómenos biológicos más importantes, es relevante en procesos como la germinación de semillas y la osmorregulación celular. Sin embargo, aún no se tiene una comprensión completa del fenómeno a nivel molecular, en este juegan un papel preponderante las acuaporinas, que son unas proteínas intrínsecas a las membranas celulares. Por tanto, en este trabajo se presenta un estudio *in silico* de dicho transporte a través de la acuaporina TIP3;1 de *Zea mays* L (Uniprot: Q9ATL7). Para lograrlo, como no se cuenta con estructura experimental de la TIP3;1, se obtuvo el modelo 3D de esta a través de *Alphafold2*. Se generó un homotetrámero con la estructura obtenida como monómero y se efectuó la inmersión del complejo en la bicapa lipídica con *CHARMM*. Posterior a la solvatación, se realizó la dinámica molecular por medio del paquete *GROMACS* durante 90 ns y se analizaron los resultados con la biblioteca *MDAnalysis*. El radio de poro obtenido para cada monómero del complejo proteico muestra una tendencia similar, la zona de permeación simple tiene una longitud de 2.1 nm y el cuello de botella del canal se ubica cerca a la cara extracelular. Además, en la zona de permeación simple el radio de poro presenta menor variación durante la simulación lo que demuestra la importancia de mantener una configuración estable para formar enlaces de hidrógeno con el agua, como se observa en la Figura 1. Algunos de los residuos implicados en los enlaces de hidrógeno son: His74, His180, Gly190. La influencia de estos enlaces sobre la movilidad del agua varía de acuerdo al tiempo de vida y se presentan valores entre (1 y 12) ps. El coeficiente de permeabilidad osmótica calculado es $450.5 \pm 71.2 \cdot 10^{14}$ cm^3 s^{-1}, magnitud mayor a los valores reportados en la literatura para otras acuaporinas de la membrana plasmática, lo que tiene sentido pues la TIP3;1 se ubica en el tonoplasto. En conclusión, la movilidad del agua es el resultado de diversos parámetros en sinergia, para caracterizar este proceso se deben tener en cuenta todos ellos.

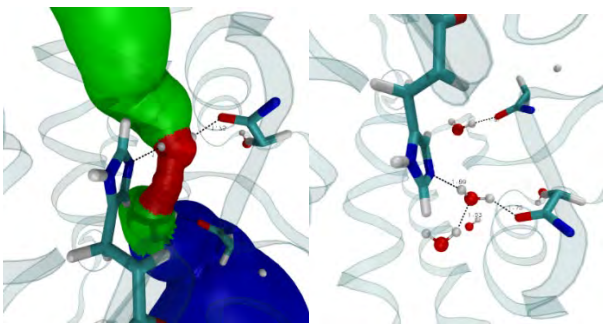


Figura 1: izquierda: perfil de poro de la TIP3;1 en el cuello de botella, cerca a la cara extracelular. Derecha: enlaces de hidrógeno en puente entre His180 - agua – Gly190 en el cuello de botella.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-432-P ***MODELO DE INTERACCIÓN A TRAVÉS DE UN ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LAS METALOENZIMAS CYP96T1 Y CYP96T6 EN LA REACCIÓN CATALÍTICA SOBRE 4-O-METILNORBELLADINA***

Modelo de Interacción a través de un Estudio Computacional De Las Metaloenzimas Cyp96t1 Y Cyp96t6 En La Reacción Catalítica Sobre 4-O-Metilnorbelladina

Johan N Anzola[a*]

a Grupo de diseño de productos y procesos, Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia
Correspondencia: j.anzolab@uniandes.edu.co

Palabras clave: Metaloenzima, CYP96T6, CYP96T1, Mutaciones, Interacciones**.**

Se realizo un estudio computacional de dos metaloenzimas citocromoP450, CYP96T1 y CYP96T6, las cuales utilizando como sustrato 4-O-metilnorbelladina, forman noroxomaritidina y N-demetilnarwedina respectivamente, CYP96T6 se forma a partir de la mutación de seis aminoácidos de CYP96T1 (A217V, V251T, W253C, K254E, L315I Y A308). Mediante técnicas computacionales como Docking molecular y Dinámica molecular, se buscó determinar la influencia de las mutaciones en la selectividad catalítica para formar N-demetilnarwedina mediante un modelo de interacción, para proponer así un posible esquema de reacción. Obteniendo como resultado que, de las mutaciones realizadas, A308L es el residuo más cercano al ligando en el sitio activo (3,42 Å) (figura1), presentando así una influencia sobre la posición que adopta el ligando. Respecto a las interacciones, el único cambio representativo fue la interacción directa de tipo puente de hidrogeno del fenol con el grupo Hemo de la proteína, estando presente en CYP96T1 mas no en CYP96T6 (figura2). Se realiza el docking final con todas las mutaciones, seleccionando la pose con el mejor puntaje (A1)(tabla1). Se concluye finalmente que, L315I y A308L influyen en la disposición del sitio activo mientras que las demás mutaciones, en la entrada del ligando a la proteína(figura3). La disposición del ligando y la interacción pi-pi stacking con el grupo Hemo permite que este inicie el ciclo catalítico característico de esta familia de metaloenzimas, permitiendo así la formación de N-demetilnarwedina(figura4). Finalmente, se llevo a cabo una dinámica molecular de 50ns, el RMSD(figura5) mostro una gran estabilidad en la proteína, el ligando presenta un movimiento considerable alrededor de los 20ns de simulación, pasando de estar en una conformación elongada a retraerse(figura6), estabilizándose finalmente a los 27ns, por otro lado, el porcentaje de ocupación de puentes de hidrogeno entre la proteína y el ligando se da con GLU385 en un 97,4%, con ILE 386 en un 40,6% y ASN123 un 10,6%, el resto de porcentajes de ocupación presentan porcentajes por debajo de 10% (figura7), de esto se concluye que además de las mutaciones, GLU385 presenta una gran influencia en la disposición del ligando y que este varia su composición espacial a los 20ns.

Anexos

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

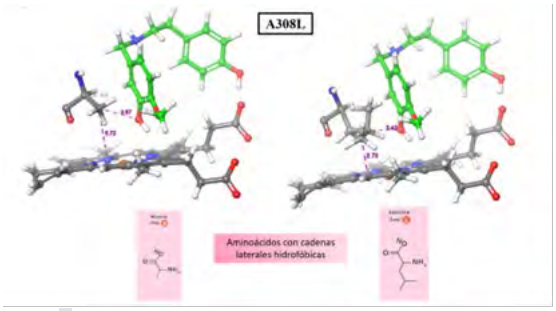


Figura 1Distancia de A308L frente al grupo Hemo y 4OMN

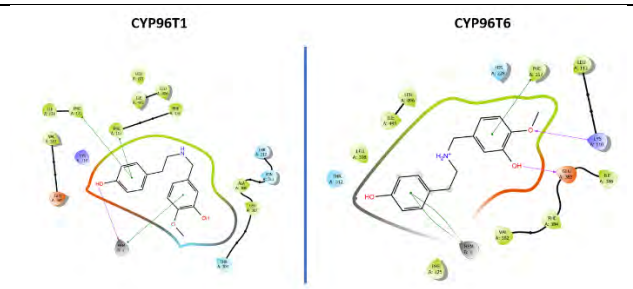


Figura 2 interacciones entre CYP96T1 y CYP96T6 con 4OMN

Tabla 1 Resultados del acoplamiento final de CYP96T6 con 4OMN

Pose	Glide Score	Puntaje del Acoplamiento	Glide emodel	Energia del Glide	Penalizacion por ionizacion	Q total	Eficiencia del ligando Glide
A1	-7.683	-7.669	-64.394	-43.627	0,0251	1	-0.383
A2	-7.671	-7.657	-64.395	-43.548	0,0251	1	-0.383
A3	-7.569	-7.555	-59.105	-38.303	0,0251	1	-0.378
A4	-7.550	-7.536	-58.823	-38.269	0,0251	1	-0.377
A5	-7.179	-7.165	-61.973	-43.396	0,0251	1	-0.358
A6	-7.127	-7.113	-54.634	-39.415	0,0251	1	-0.356
A7	-6.954	-6.940	-60.131	-41.964	0,0251	1	-0.347
A8	-6.936	-6.922	-52.350	-38.349	0,0251	1	-0.346
A9	-6.648	-6.634	-49.599	-36.076	0,0251	1	-0.332
A10	-6.427	-6.413	-49.652	-34.609	0,0251	1	-0.321

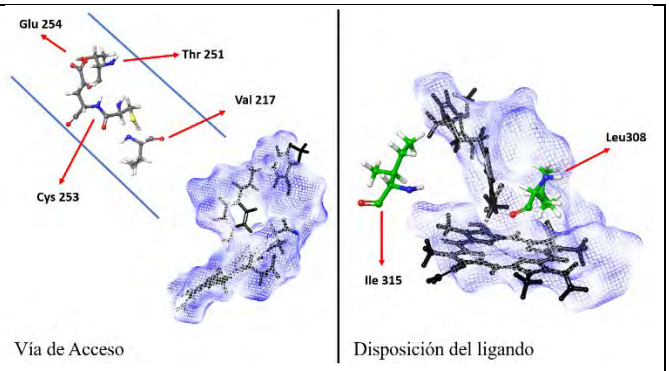


Figura 3 Influencia de las mutaciones en la disposición del ligando

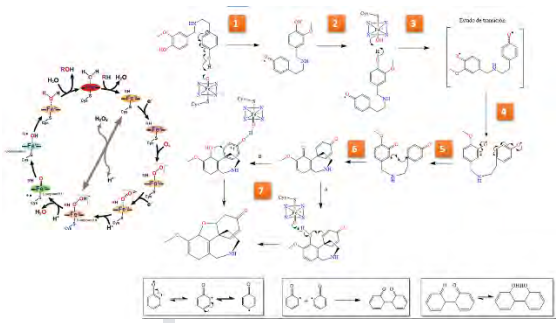


Figura 4 Posible esquema de reacción

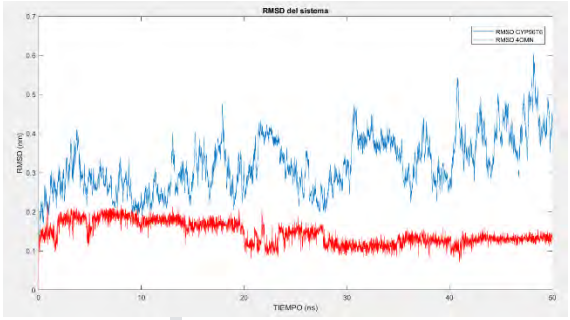


Figura 5 RMSD de CYP96T6 y 4OMN

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

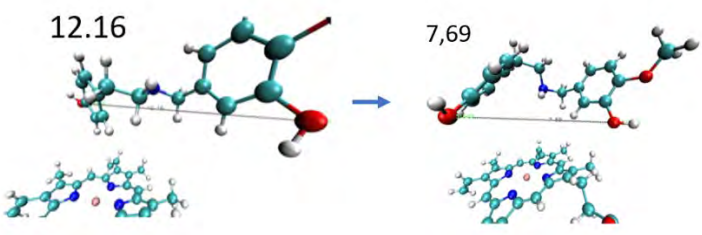


Figura 6 Cambio en la disposición

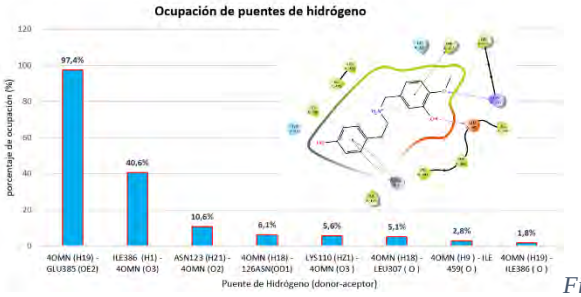


Figura 7 Ocupación de puentes de hidrogeno del ligando, la distancia entre anillos se ve reflejada en

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-449-P ***ESTUDIO COMPUTACIONAL DE VARIACIONES SOBRE EL GEN CNR1 Y SUS IMPLICACIONES EN LA INTERACCIÓN DEL RECEPTOR CB1 CON EL RIMONABANT***

Estudio Computacional de Variaciones Sobre el Gen CNR1 y sus Implicaciones en la Interacción del Receptor CB1 con el Rimonabant

***Gian P Miscione[a], Luisa F Arias[b]**

[a] *Departamento de Química, Universidad de los Andes, Colombia*

[b] *Departamento de ingeniería y Departamento de Biología, Universidad de los Andes, Colombia*

**Autor de correspondencia: gp.miscione57@uniandes.edu.co*

Palabras Claves: Sistema endocannabinoide; FEP (*Free Energy Perturbation);* Rimonabant*;* Obesidad.

El receptor cannabinoide tipo 1 (CB1) forma parte del sistema endocannabinoide, crucial para regular la homeostasis en procesos como el apetito, dolor y estado de ánimo. Se busca desarrollar fármacos que actúen en CB1, como el Rimonabant, para tratar la obesidad. Sin embargo, el uso de Rimonabant ha estado vinculado a problemas de ansiedad y depresión debido a su interacción con CB1.

Este proyecto tiene como objetivo investigar cómo las mutaciones en el gen NCR1, que codifica el receptor CB1, afectan la unión energética y el modo de acción del Rimonabant. Se busca entender si los cambios en la energía de unión y la forma en que el fármaco se une al receptor están relacionados con cambios en la estructura del CB1 mutado, que podrían causar los efectos adversos. La confirmación de esta hipótesis permitiría ajustar el diseño del fármaco para tratar la obesidad sin generar problemas de depresión.

Hasta ahora, se han obtenido las estructuras adecuadas del receptor CB1 y sus variantes tanto normales como mutadas. Se crearon sistemas de membrana con el receptor y el ligando Rimonabant para llevar a cabo simulaciones de dinámica molecular de 50 ns. Los resultados muestran que ciertos residuos en el sitio activo del receptor, como GLU252, LEU277, TYR310 y LYS324, presentan fluctuaciones significativas, lo que podría influir en la interacción con Rimonabant, ya que están a una distancia promedio de 6.2 Å del ligando. La membrana se mantuvo estable durante las simulaciones, apuntando a que no influye considerablemente en la interacción entre el receptor y el fármaco.

Para profundizar en la comprensión del CB1, se planea continuar con la metodología realizando un análisis de agrupamiento basado en la posición del ligando y luego llevar a cabo simulaciones de dinámica molecular más largas (500 ns). Además, se prevé realizar cálculos de energía libre (FEP) y muestreo de estados de perturbación (OPES).

Este estudio busca esclarecer cómo las mutaciones en CB1 impactan la interacción con el Rimonabant, proporcionando información clave para el diseño de fármacos más efectivos y seguros en el tratamiento de la obesidad.

Referencias:

(1) Lu, H.-C.; Mackie, K. Review of the Endocannabinoid System. *Biol. Psychiatry Cogn. Neurosci. Neuroimaging* **2021**, *6* (6), 607–615. https://doi.org/10.1016/j.bpsc.2020.07.016.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

(2) *Rimonabant: an antagonist drug of the endocannabinoid system for the treatment of obesity | SpringerLink*. https://link.springer.com/article/10.1016/S1734-1140(09)70025-8 (accessed 2023-07-17).

(3) Moreira, F. A.; Crippa, J. A. S. The Psychiatric Side-Effects of Rimonabant. *Braz. J. Psychiatry* **2009**, *31*, 145–153. https://doi.org/10.1590/S1516-44462009000200012.

(4) *GCFI - tienda terminos*. https://www.minsalud.gov.co/sites/rid/Lists/BibliotecaDigital/Forms/tienda%20terminos.aspx?RootFolder=%2fsites%2frid%2fLists%2fBibliotecaDigital%2fRIDE%2fVS%2fED%2fGCFI&FolderCTID=0x012000D4CDD61CAE671A41B3532ECA51ACD38E#InplviewHashff075032-45e6-459a-a1ac-23ee30f5b56d=Paged%3DTRUE-p_Created%3D20220119%252014%253a27%253a59-p_ID%3D24843-RootFolder%3D%252Fsites%252Frid%252FLists%252FBibliotecaDigital%252FRIDE%252FVS%252FED%252FGCFI-FolderCTID%3D0x012000D4CDD61CAE671A41B3532ECA51ACD38E-SortField%3DCreated-SortDir%3DDesc-PageFirstRow%3D101 (accessed 2023-07-17).

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

III-478-P ***ESTUDIO TEÓRICO DE LAS PROPIEDADES MAGNÉTICAS DE MAGNETITAS (FE2.875X0.125O4) MODIFICADAS CON VACANCIAS Y DOPANTES DE LA PRIMERA SERIE DE TRANSICIÓN***

Estudio teórico de las propiedades magnéticas de magnetitas ($Fe_{2.875}X_{0.125}O_4$) modificadas con vacancias y dopantes de la primera serie de transición

Brigith S Holguín [a], Mauricio Rodas [a]*, Javier Torres [b]

[a] *Grupo de investigación de Química teórica y Bioinformática (QTB), Departamento de Química, Universidad de Caldas, Colombia*
[b] *Grupo de investigación de Magnetobiología, Departamento de Física, Universidad de Caldas, Colombia*

* *Autor de correspondencia: mauricio.rodas@ucaldas.edu.co*

Palabras Claves: efecto Jan Teller; magnetoquímica; magnetismo; modelos de simulación.

La magnetita (Fe_3O_4) es un compuesto ferrimagnético que exhibe anisotropía magnetocristalina y es susceptible a múltiples factores como el tamaño y la morfología del cristal. Las características magnéticas de la magnetita han demostrado ser de gran importancia en diversas áreas de investigación, como el almacenamiento magnético, tratamiento por hipertermia, mejoramiento y contraste de imágenes por resonancia magnética, entre otras. A pesar de los diversos estudios realizados y el interés creciente en los materiales de tipo magnetita, aún no se han llevado a cabo estudios sistemáticos experimentales ni teóricos que permitan comprender el comportamiento del material cuando se presentan modificaciones de dopaje o vacancias extrínsecas. Por esta razón, a nivel teórico por medio del programa VAMPIRE se caracterizaron algunas propiedades magnéticas de diferentes magnetitas. Para los cálculos las estructuras magnéticas fueron modificadas con dopaje de los metales de la primera serie de transición en las posiciones tetraédricas de Fe^{3+}, octaédricas de Fe^{3+} y Fe^{2+}, y se generaron vacancias en las mismas posiciones. Para analizar las propiedades magnéticas inherentes al ciclo de histéresis se utilizó el método de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG), y para la susceptibilidad magnética y temperatura de Curie se utilizó el método de Monte Carlo. Se logró determinar que las propiedades magnéticas de la magnetita no varían solo por el número de espín magnético de los defectos introducidos, sino que en los cambios experimentados también influyen: la interacción ligando-metal y metal-metal, el efecto Jan Teller, el poder oxido-reductor del dopante, el valor de la constante de interacción de intercambio, y las interacciones de superintercambio como las asimétricas. Los anteriores hallazgos permiten aportar a la construcción del entendimiento de estas estructuras magnéticas y poder modificar el material según las necesidades del investigador.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

QUÍMICA VERDE Y SOSTENIBLE

VI-218-P ***ESTUDIO COMPARATIVO DE CATALIZADORES FEOX/SIO2, VOX/SIO2, WOX/SIO2 Y VOX-WOX/SIO2 SINTETIZADOS POR EL MÉTODO SOL-GEL EN LA CONVERSIÓN DE XILOSA A FURFURAL***

Estudio Comparativo de Catalizadores $FeOx/SiO_2$, VOx/SiO_2, WOx/SiO_2 y $VOx-WOx/SiO_2$ Sintetizados por el Método Sol-Gel en la Conversión de Xilosa a Furfural

Kevin R Suárez [a, b] *, William G Cortes [a], Carlos A Guerrero [b]

[a] *Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad El Bosque, Bogotá, Colombia*
[b] *Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia*
* *Autor de correspondencia: ksuarez@unal.edu.co*

Palabras Claves: Xilosa; sol-gel; catálisis heterogénea; furfural.

El objetivo del presente estudio es evaluar la obtención de furfural a partir de xilosa utilizando catalizadores sólidos de hierro, vanadio y tungsteno soportados en óxido de silicio.

Los catalizadores fueron sintetizados empleando el método sol-gel y caracterizados por técnicas como XRD, FT-IR, TPR, espectroscopía Raman y adsorción-desorción de nitrógeno. Los catalizadores fueron evaluados en la obtención de furfural a partir de xilosa a una temperatura de 170 °C por 120 min a 300 rpm empleando un reactor discontinuo con atmosfera inerte para evitar reacciones de oxidación.

La caracterización de los materiales por XDR evidencia la presencia de sílice amorfa correspondiente al soporte de los catalizadores. Por medio de FT-IR se logró establecer que los materiales cuentan con grupos OH en su estructura, mientas que la espectroscopia Raman y XDR logró identificar la presencia de Fe, V y W en cada uno de los catalizadores sintetizados.

Para los materiales monometálicos y bimetálicos de vanadio y tungsteno, se observaron conversiones superiores al 75 % en mol, mientras que el catalizador de hierro presento una conversión superior al 55 % en mol. En cuanto a la selectividad hacia furfural el material catalítico de hierro presenta un 40 % en mol, mientras que el catalizador de tungsteno 12 % en mol.

Con base en lo anterior, la presencia de sitios ácidos de Lewis promueve la isomerización de xilosa a xilulosa y los sitios ácidos de Brönsted promueven la deshidratación hasta furfural. La mayor selectividad a partir del catalizador de hierro se debe a que es el centro activo que presenta mayor electronegatividad y por ende mayor acidez de Lewis, mientras que la baja conversión es atribuida a la baja carga de metal en el catalizador.

Se evidencia que los materiales catalíticos sintetizados son activos para la conversión de xilosa. También se determinó que los centros activos con mayor acidez de Lewis resultan ser más selectivos a furfural. Finalmente, los sitios ácidos de Brönsted atribuidos a los grupos silanol y el medio de reacción influyen en el proceso de conversión de xilosa a furfural.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VI-220-P ***EVALUACIÓN DE LA OBTENCIÓN DE BIODIESEL MEDIANTE TRANSESTERIFICACIÓN ENZIMÁTICA A PARTIR DE ACEITE DE COCINA USADO ASISTIDO POR MICROONDAS.***

Evaluación de la Obtención de Biodiesel Mediante Transesterificación Enzimática a Partir de Aceite de Cocina Usado Asistido por Microondas.

Ana M. Delgado[a], **Ricardo Benitez**[a],* **Jeyson C. Mitte** [a]

[a] *Química de Productos Naturales (QPN), Universidad del Cauca, Colombia.*
** Autor de correspondencia: rbenitez@unicauca.edu.co.*

Palabras Claves: Biocombustible; Lipasa inmovilizada; Etil Ésteres de Ácidos Grasos; Síntesis verde.

El biodiesel es la alternativa más popular en el reemplazo de los combustibles fósiles, por su carácter biodegradable, en el marco de la actual transición energética, la demanda de este biocombustible va en aumento en Colombia,[1] actualmente, su producción se ha realizado a partir de aceite de palma o del híbrido OxG (un cruce entre Eleasis Oleifera y Eleusis guineensis); no obstante, existe el riesgo de comprometer el uso del suelo por la expansión de los monocultivos que a largo plazo genera problemas a los bosques nativos, de modo que podría llegar a un biodiesel insostenible.[2] Así pues, se propone como objetivo evaluar la obtención del biocombustible mencionado, de manera sostenible y menos contaminante mediante el uso de una enzima comercial y un técnica de calentamiento verde, como lo es la irradiación por microondas. [3] En este estudio se realizó la reacción de transesterificación enzimática, empleando la enzima comercial Lipozyme 435 y etanol, usando como materia prima aceite de cocina usado de un establecimiento comercial. La síntesis se llevó a cabo mediante irradiación de microondas y calentamiento convencional hasta un máximo de 5 horas, posteriormente se analizó por espectroscopia infrarroja, análisis de masas, con el fin de comparar las dos rutas de calentamiento. Se pudo encontrar por identificación del espectro de infrarrojo y masas la presencia de etil ésteres de ácidos grasos, principalmente, el etil oleato y palmitato, a diferencia a lo hallado en el calentamiento convencional, (ver Figura 1), lo cual implica, una metodología promisoria para la obtención de biodiesel con bajo impacto ambiental.

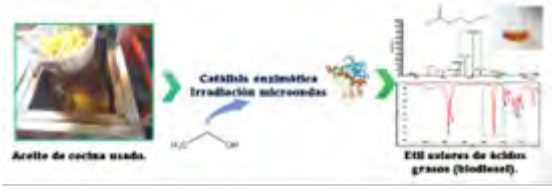


Figura 1. Resumen gráfico de la obtención de biodiesel mediante catálisis enzimática.

Referencias:

[1]J. L. Coy, J. V. Jurado, S. H. Velásquez, and E. B. Acevedo," *Análisis del sector biodiésel en Colombia y su cadena de suministro"*, 1.ª ed ed. Barranquilla, Colombia: Universidad del Norte, 2015.
[2]S. Rangaraju, "*10 years of EU fuels policy increased EU's reliance on unsustainable biofuels*," Transport&Environment, Julio 2021.
[3]M. Y. Liow *et al.*, "Towards rapid and sustainable synthesis of biodiesel: A review of effective parameters and scale-up potential of intensification technologies for enzymatic biodiesel production," *Revista de química industrial y de ingeniería*, vol. 114, pp. 1-18, 2022.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VI-221-P ***ESTUDIO TERMODINÁMICO Y CINÉTICO DE LA VALORIZACIÓN DE DERIVADOS FENÓLICOS PROVENIENTES DE LA BIOMASA DEL PSEUDOTALLO DEL PLÁTANO DOMINICO-HARTÓN (MUSA AAB SIMMONDS)***

Estudio Termodinámico y Cinético de la Valorización de Derivados Fenólicos Provenientes de la Biomasa del Pseudotallo del Plátano Dominico-Hartón (Musa AAB Simmonds).

Paula A Rojas [a], Nahury Y Castellanos [b*], Johny R Rodríguez [b], Hector F Cortés [c], *

[a] Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías, Universidad del Quindío, Colombia
[b] Unidad de Ciencias Básicas, Escuela de Ciencias Básicas Tecnología e Ingeniería, Universidad Nacional Abierta y a Distancia, Colombia
[b] Grupo de Investigación en Fotocatálisis y Estado Sólido, Escuela de Química, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia

** Autor de correspondencia: nahury.castellanos@unad.edu.co*

Palabras Claves: Biomasa; Catálisis Homogénea; Cinética de Reacción; Hidrogenación; Lignina; Propiedades

Colombia es un país con una amplia actividad agrícola, ésta genera una gran cantidad de residuos que en su mayoría no son aprovechados. En el proceso de cosecha el racimo de plátano se desecha el 80% de la planta, constituida en su mayor parte por pseudotallo y solo se aprovecha su fruto el cual representa una pequeña parte de toda la biomasa generada. En el presente trabajo se presenta el estudio termodinámico y cinético de la valorización de derivados fenólicos provenientes de la lignina en el pseudotallo del plátano Dominico-Hartón (Musa AAB Simmonds). Para extraer la lignina del pseudotallo se siguió la metodología ASTM D 1106. Su caracterización se realizó mediante FT-IR, determinando la presencia de compuestos fenólicos los cuales fueron extraídos de la lignina por medio de hidrogenación catalítica homogénea, utilizando: 50,4 mg de lignina; 4,75 mg de la sal $NiCl_2.6H_2O$ como precursor catalítico, y etanol como donador de hidrógeno y disolvente mediante una mezcla de etanol más agua al 50% v/v y agitación constante de 500 rpm. Se aplicó un diseño central rotatorio (software militab), donde las variables independientes son dos: el tiempo de reacción entre 1 h y 8 h y la temperatura entre T de 25°C y 240 °C; la variable de respuesta a evaluar serán los compuestos fenólicos totales (CFT) determinados bajo el método Folin-Ciocalteu. Se realizaron 13 reacciones aleatorias; maximizando la variable de respuesta. Se determinaron las condiciones óptimas de reacción a 25 °C y un tiempo de reacción de 4,8 h. La cinética de la reacción óptima se determinó por método grafico en el que se establece que el modelo que más se ajusta es de pseudoorden uno, para las variables termodinámicas se realizó el análisis DSC y TGA, donde se obtuvo una temperatura de transición vítrea aproximada a los 150°C, una temperatura de recristalización de 455°C con un calor latente de 630,4 J/g°C, la temperatura de fusión fue de 718°C con un calor latente de 8602,42 J/g°C. En este sentido, se logró valorar la biomasa generada en las cosechas del plátano, constituida por el pseudotallo, identificándola como una potencial fuente de lignina.

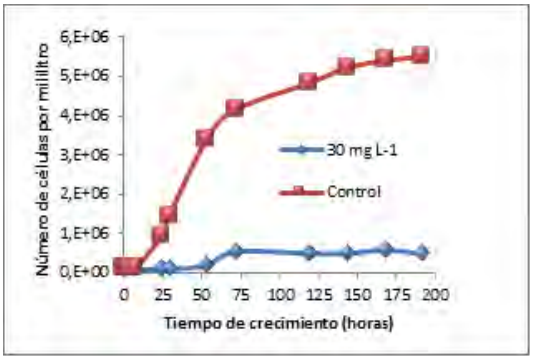
Estudio Preliminar del Crecimiento de la Microalga de Agua Dulce *Chlorella vulgaris* en Medio Líquido Contaminado con Loratadina

Karen V. Torres [a], Fernando J. Hernández [b],*

[a] *Grupo de Investigación de Química de Compuestos Bioactivos Q.C.B., Universidad del Cauca, Colombia*
[b] *Grupo de Investigación de Química de Compuestos Bioactivos Q.C.B., Universidad del Cauca, Colombia*
**Autor de correspondencia: fjhernandez@unicauca.edu.co*

Palabras claves: *C. vulgaris;* microalgas; loratadina,

Con este trabajo se busca estudiar la influencia de la adición de un contaminante emergente (CE) tipo fármaco, específicamente loratadina, en el crecimiento celular de la micoralga *C. vulgaris* como un estudio inicial para el posterior empleo de la especie en la degradación del CE. Se realizó este procedimiento empleando 140 mL de cultivo Bristol con 0,1% en peso de proteosa, empleado generalmente como medio de cultivo de la especie *C. vulgaris*. Se le agregó una alícuota de solución de loratadina para tener en el medio de cultivo una concentración de 30.00 mg/L y 3 mL de un cultivo con un valor de absorbancia de 1.000 con una cantidad de especies de $5x10^6$ células por mililitro. Se realizó el seguimiento del crecimiento de la especie en medio líquido con y sin contaminante por medio de la técnica de espectrofotometría en UV-Vis a una longitud de onda de 684.5 nm, longitud de onda de absorción de clorofila y a la vez se confirmó el conteo celular empleando la cámara de Neubauer. Los resultados mostraron inhibición del crecimiento de la especie *C. vulgaris* por la presencia de loratadina en solución comparado con el cultivo control, como se aprecia en la gráfica 1. Al realizar la comparación, la concentración de 30 mg/L señala la reducción del número de células de manera significativa frente al cultivo control en un período de 192 horas (8 días), tiempo en el cual la adición de 30 mg/L de loratadina disminuye el crecimiento de la especie un 79,1% frente al control. Se realizó la prueba-t asumiendo varianzas iguales y se encontró que el valor estadístico t es mayor al valor crítico de t, indicando que hay diferencia en el crecimiento celular de un cultivo control frente a uno con 30 mg/L de loratadina. Se plantea la continuación del estudio monitoreando si el medio contaminado alcanza en un periodo más prolongado su adaptación al medio y además, ensayos con diferentes valores de concentración del contaminante para evaluar el comportamiento de la especie.



Gráfica 1. Efecto de la presencia de loratadina en el crecimiento de la especie *C. vulgaris*

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VI-223-P ***SÍNTESIS MECANOENZIMÁTICA DE PÉPTIDOS DERIVADOS DE LA (S)-PROLINA Y LA (S)-FENILALANINA***

Síntesis Mecanoenzimática de Péptidos Derivados de la (*S*)-Prolina y la (*S*)-Fenilalanina

Alexandra Ríos-Echeverri [a], Karen J. Ardila-Fierro [a], José G. Hernández [a]*

[a] *Grupo de Investigación Ciencia de los Materiales (CIENMATE), Universidad de Antioquia, Colombia*
* *Autor de correspondencia: joseg.hernandez@udea.edu.co*

Palabras Claves: Enzima; mecanoquímica; molienda de bolas; papaína; péptidos

Los polipéptidos son biomacromoléculas con gran potencial en áreas como la ciencia de los materiales, la biomedicina y la catálisis.[1] Su síntesis es normalmente llevada a cabo mediante procesos en fase líquida y sólida, o mediante la polimerización de N-carboxianhídridos de aminoácidos. Estas estrategias presentan inconvenientes metodológicos y baja sostenibilidad debido a las múltiples etapas de protección/desprotección de grupos funcionales, al uso de activadores tóxicos, a la sensibilidad de los sustratos a la humedad, y a la generación de grandes cantidades de disolventes nocivos. Como estrategia más sostenible se ha venido popularizando el uso de enzimas tales como las proteasas (p. ej. papaína) para llevar a cabo la oligomerización de aminoácidos. En este proyecto de investigación estudiamos la capacidad de la papaína para favorecer la oligomerización mecanoquímica del HCl·(*S*)-Phe-OCH_3 en ausencia de disolventes y mediante molienda de bolas lo cual dio lugar a NH_2-(Phe)$_n$-OMe (**Figura 1a**). La metodología optimizada fue puesta a prueba en la síntesis de productos del tipo (*S*)-Pro-[(*S*)-Phe]$_n$(*S*)-Phe-OCH_3, los cuales son péptidos promisorios para ser usados como organocatalizadores (**Figura 1b**). Durante la exposición se presentará la optimización de las condiciones mecanoquímicas (p. ej. frecuencia y tiempo de molienda, estequiometría, etc.), se discutirá el grado de oligomerización (DP) de los oligopéptidos obtenido por Resonancia Magnética Nuclear, así como también su caracterización estructural.

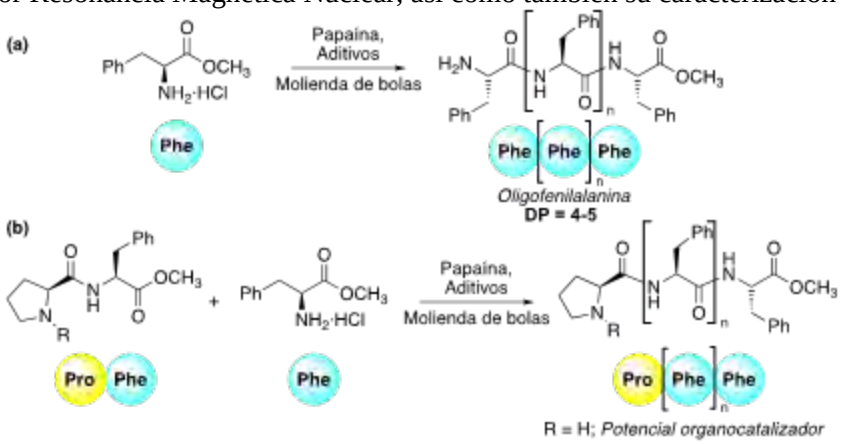


Figura 1. Síntesis mecanoquímica de péptidos derivados de la (*S*)-fenilalanina (Phe) y (*S*)-prolina (Pro).

[1] K. J. Ardila-Fierro, D. E. Crawford, A. Körner, S. L. James, C. Bolm, José G. Hernández, *Green Chem.* **2018**, *20*, 1262.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VI-309-P ***OBTENCIÓN DE BIOCARBÓN A PARTIR DE BIOMASA DEL PROCESAMIENTO DE PULPA DE ASAÍ (EUTERPE PRECATORIA MART.)***

Obtención de Biocarbón a Partir de Biomasa del Procesamiento de Pulpa de Asaí (*Euterpe precatoria* Mart.)

David M. Mosquera[a]; Marcela P. Carrillo[a]*, Luisa L. Orduz-Díaz[a], Diana C. Guerrero[a]
[a] *Instituto Amazónico de Investigaciones Científicas SINCHI, Colombia*
* *Autor de correspondencia: mcarrillo@sinchi.org.co*

Palabras Claves: Biocarbón, biomasa, palma amazónica, economía circular

El asai (*Euterpe precatoria* Mart) es una palma perteneciente a la familia Arecaceae, que crece de manera silvestre en los bosques de la Amazonía colombiana. Sus frutos esféricos de color negro violáceo de 1,0 □ 0,2 cm de diámetro son aprovechados por diferentes comunidades indígenas y colono-campesinas, para la obtención de una pulpa con un elevado contenido de antocianinas (1136,312 ± 204 mg cianidina-3-glucósido/kg de pulpa). Cómo resultado de la transformación se obtiene un subproducto que corresponde aproximadamente al 50% del peso de los frutos, con un alto contenido de fibra cruda (48%).

Una de las asociaciones que transforma y comercializa la pulpa de asaí en el departamento de Amazonas es La Asociación de Mujeres Emprendedoras del Corregimiento Departamental de La Pedrera (Amazonas)- ASOMEPED, quien cuenta con un permiso para aprovechar hasta 43t/año de frutos de asaí. De este proceso se estima la producción de 21,5 t/año de subproductos utilizados en muy baja cantidad para la elaboración de artesanías y la regeneración de la especie. Teniendo en cuenta el potencial impacto económico y ambiental que puede ocasionar el bajo aprovechamiento de estos subproductos, se hace necesario explorar alternativas para su uso.

En el presente estudio, se utilizaron 1.5 kg de subproductos de pulpa de asaí, los cuales se mezclaron con una fuente de urea en una proporción entre el 5 al 10% y posteriormente se sometieron a un proceso de grafitización con catalizador de nitrato de hierro a 900 °C aproximadamente, durante 60 minutos. Posteriormente, el biocarbón obtenido se evaluó en una solución de azul de metileno y agua a una concentración de 20 mg/L, logrando degradar el azul de metileno en un rango de 5 - 6 minutos de exposición a luz solar. Es probable que durante la carbonización los residuos sufrieran cambios estructurales, formando un material semiconductor conocido como nitruro de carbón grafitico, el cual, junto al carbón aportado por el subproducto, mejoran las propiedades fotocatalíticas, con propiedades no solo para la adsorción contaminantes, sino para su oxidación descomponiéndolos con la ayuda de la luz solar.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VI-351-P ***USO DE UNA NUEVA TÉCNICA PARA EXTRACCIÓN DE COMPUESTOS FITOQUÍMICOS DE TRADESCANTIA ZEBRINA Y JUGLANS NEOTROPICA MEDIANTE COMBINACIÓN DE MICOEXTRACCIÓN EN FASE SÓLIDA Y UN DISPOSITIVO DE DISCO ROTATORIO.***

Uso de una Nueva Técnica para Extracción de Compuestos Fitoquímicos de *Tradescantia zebrina* y *Juglans neotropica* Mediante Combinación de Micoextracción en Fase Sólida y un Dispositivo de Disco Rotatorio.

Edgar A. Polo [a], **John J. Ríos** [b], **Lizbeth L. López** [c]*

[a, b] *Grupo de Investigación en Electroquímica y Medio Ambiente GIEMA. Facultad de Ciencias Básicas. Universidad Santiago de Cali. Cali. Colombia*

[c] *Grupo de Investigación en Productos Naturales y Alimentos GIPNA. Facultad de Ciencias Naturales y Exactas. Universidad del Valle. Cali. Colombia.*

**Autor de correspondencia: lizbeth.lopez@correounivalle.edu.co*

Palabras clave: *Juglans neotropica; Tradescantia zebrina*; Fitoquímicos; SPME; RDSE.

En esta investigación se aplicó una novedosa técnica para extraer metabolitos especializados basada en la combinación de la microextracción en fase sólida y un dispositivo de disco rotatorio, sobre las plantas *Juglans neotropica* (nogal) y *Tradescantia zebrina* (panameña). Con el objeto de hallar los metabolitos especializados de dichas plantas se empleó la herramienta de cromatografía de gases acoplada a masas (GCMS). Así, la metodología empleada consistió en averiguar primero el solvente adecuado, que fuese cercano a los principios de la química verde, es decir, ecológico, y segundo, sondear las condiciones óptimas de extracción, específicamente: temperatura, agitación y tiempo. Por consiguiente, los solventes ensayados fueron: etanol, metanol, agua y mezclas de etanol-agua y metanol-agua. Se obtuvieron los lixiviados de ambas plantas en metanol como solvente adecuado, en 60 minutos, 40°C y 600 rpm. En tales lixiviados los componentes principales, para *Juglans neotropica* fueron: juglona, neofitadieno y el farneseno; y los componentes principales, para *Tradescantia zebrina* fueron: neofitadieno y fitol.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VI-370-P ***EXTRACTO TOTAL DE LIPPIA ALBA COMO AGENTE REDUCTOR EN LA SÍNTESIS NO CONVENCIONAL DE NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS HÍBRIDAS ASISTIDA POR MICROONDAS.***

Extracto total de *Lippia alba* como agente reductor en la síntesis no convencional de nanopartículas magnéticas híbridas asistida por microondas

Marlon H. Velásquez [a], ***Andrea C. Cabanzo*** [b]

[a]*Grupo de Investigación de Química de Compuestos Bioactivos QCB, Universidad del Cauca, Colombia.*
[a]*Grupo de Investigación de Química de Compuestos Bioactivos QCB, Universidad del Cauca, Colombia.*
** Autor de correspondencia: marlonh@unicauca.edu.co, acabanzo@unicauca.edu.co*

Palabras Claves: Nanopartículas, Ultrasonido, Microondas, *Lippia Alba*

En este estudio se desea utilizar los extractos etanolicos totales de la *Lippia alba* como agente reductor para la síntesis de nanopartículas magnéticas de tipo ferritas de cobre con la finalidad implementar una metodología alternativa de síntesis y con la cual se pueda sustituir a los agentes reductores usados convencionalmente; los cuales en diversos estudios se ha demostrado que son perjudiciales para el medio ambiente y la salud. Este trabajo de investigación se dividió en dos fases, la primera, la obtención del extracto de *Lippia alba* con metodologías verdes; y la segunda, síntesis de las nanopartículas magnéticas híbridas.

La obtención del extracto etanolico total se realizó mediante la extracción asistida por ultrasonido (EAU) y extracción asistida por microondas (EAM). Para determinar las mejores condiciones para la extracción, se llevó a cabo un diseño experimental factorial 2^3 para ambas técnicas, teniendo como variables la relación de etanol-muestra, tiempo, temperatura (solo para EAU) y potencia (solo para EAM). Los resultados obtenidos en términos de porcentajes de rendimiento estuvieron en un rango del 6% al 10% para ambas técnicas; no obstante, el tiempo requerido por EAM es 5 veces menor que por EAU. Se escogió el extracto que presentó mayor porcentaje de rendimiento para la síntesis no convencional de las nanopartículas.

Un volumen de 10 mL del extracto obtenido en la fase anterior, actuó como agente reductor en la síntesis no convencional de las nanopartículas, adicionando una mezcla de soluciones de Fe(III) y Cu(II). La muestra fue irradiada vía microondas con una potencia del equipo a 800W durante 16 min. Una vez finalizada la reacción el sólido se calcinó a 800°C durante 2 horas. Finalmente, una vez obtenido el material fue analizado por IR, observándose la banda característica de la formación tipo espinela de las ferritas de cobre, al igual que se comprobó su posible propiedad magnética de forma cualitativa haciendo uso de un imán. Por lo tanto, se podría usar el extracto total de la *Lippia alba* en la síntesis no convencional de las nanopartículas híbridas magnéticas de tipo ferritas de cobre.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.

VI-484-P ***EVALUACIÓN DEL POTENCIAL DE PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO A PARTIR DE BIOGÁS EN COLOMBIA EMPLEANDO ASPEN HYSYS.***

Evaluación del Potencial de Producción de Hidrógeno a Partir de Biogás en Colombia Empleando Aspen Hysys.

Geraldynne Sierra*[a], Johana Orjuela[b], Bernay Cifuentes[c]

[a] *Estudiante de Ingeniería Química, Universidad de la Salle, Facultad de Ingeniería, Semillero de Investigación EMPTROPIQ, Colombia.*

[b] *Estudiante de Doctorado, Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Ingeniería, Colombia.*

[c] *Doctorado, Universidad de La Salle, Facultad de Ingeniería, Semillero de Investigación EMPTROPIQ, ORCID: 0000-0002-3654-2069., Colombia.*

** Autor de correspondencia: gsierra10@unisalle.edu.co.*

Palabras Claves: Biogás; Energías alternativas; Hidrógeno Verde; Transición Energética; Simulación Avanzada de Procesos

Colombia tiene una ubicación geográfica privilegiada, junto con una amplia diversidad de climas y ecosistemas, lo que podría favorecer la generación de energía a partir de fuentes alternativas que reemplacen progresivamente los combustibles fósiles. Por ejemplo, el biogás (gas con alto contenido de metano) es un sustituto del gas natural y se obtiene a partir de biomasa residual orgánica, usando procesos como la gasificación y la co-digestión. Así, la combustión del biogás se usa para generar calor; pero, durante el proceso también se liberan contaminantes. Por ello, una alternativa prometedora es usar el biogás como fuente de hidrógeno, un combustible limpio que se promueve en la ley 2099 de 2021 y en el Plan Energético Nacional. Por ello, este trabajo se enfocó en la evaluación del potencial de producción de hidrógeno a partir de biogás, usando simulación avanzada de procesos en el software ASPEN HYSYS®. La simulación incluyó varias etapas de proceso (Figura 1): i) el reformado de biogás, ii) la reacción de desplazamiento de gas de agua (WGS), iii) la purificación del hidrógeno de la mezcla de gases (H_2O, CO_2 y CH_4) por adsorción con oscilación de presión (PSA), y iv) la recuperación de calor del gas residual. Los resultados obtenidos muestran que el consumo total de energía para producir 1 kg/h de H_2 es de 53.7 kW, el flujo másico producido de H_2 es de 4.26 kg/h y el consumo total de energía es de 228.8 kW. Esta investigación es un primer paso en la evaluación de la tecnología de aprovechamiento del biogás producido en el país como fuente de producción de H_2. Asimismo, se están adelantando análisis de costos para determinar la viabilidad de esta tecnología en Colombia.

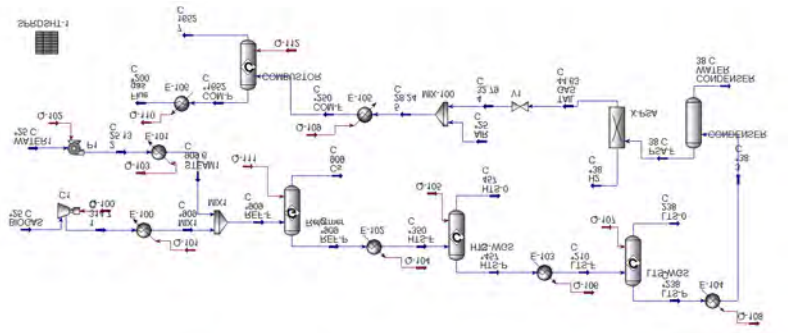


Figura 1. Simulación de la producción de hidrógeno a partir de biogás en Aspen HYSYS en Colombia

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.



Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación | Reconocimiento como Universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964. Reconocimiento personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949 Minjusticia.