



IX Simposio de Química
Aplicada (IX SIQUIA) y
I Congreso Internacional
de Nanoquímica,
Nanofísica y Nanomedicina
(I CINNN)

21, 22 y 23 DE AGOSTO, 2019 CENTRO CULTURAL METROPOLITANO DE CONVENCIONES, ARMENIA, QUINDÍO.

- Química analítica y medio ambiental
- · Química y Física Cuántica
- · Ciencia y Tecnología de Alimentos
- Nanomateriales
- Nanobiotecnología y Nanomedicina
- Fisicoquímica y Electroquímica

CURSOS PRE-CONGRESO

19 y 20 de agosto 2019 Universidad del Quíndio. **Armenia, Quindío**

RECEPCIÓN DE RESÚMENES

Ponencias orales y póster. 30 de Mayo de 2019

INFORMACIÓN:

Programa de Química, Universidad del Quindío Cra. 15 #12N, Armenia, Quindío 316 5351041 / 317 7052722 siquia@uniquindio.edu.co

https://siquia4.wixsite.com/siquia

Organiza:





Apoyan:







PRESENTACIÓN

El Simposio de Química Aplicada (SIQUIA) es un evento bianual realizado por el programa de química de la Universidad del Quindío, en el participan investigadores a nivel nacional e internacional, dando a conocer resultados de investigaciones en diversas áreas de la química y su aplicación nivel académico e industrial. Este año, en su IX versión la temática principal fueron la nanociencia y nanotecnología, por lo que paralelo se realizó el I Congreso Internacional de Nanoquímica, Nanofísica y Nanomedicina (I CINNN) resaltando la importancia de estas áreas a nivel nacional e internacional.

COMITÉ ORGANIZADOR:

Dra. Diana Blach Vargas Dr. Cristian Camilo Villa Zabala Dr. Jorge Andres Gutierrez Cifuentes

COMITÉ CIENTIFICO:

Dr. Andres Mauricio Rojas (UAN – Colombia)
Dra. Clara Juliana Durango (UAN – Colombia)
Dr. Sergio Ismael Blanco (UIS – Colombia)
Dr. Eduart Gutierrez (UIS – Colombia)
Dra. Jenniffer Cruz Laiton (Universidad de Santander – Colombia)
Dra. Yenni Patricia Avila (USC – Colombia)
Dr. Oscar Marin (Universidad Nacional de Tucuman – Argentina)
Dr. Andres Felipe Garces (Instituto Catalan de Investigacion Quimica – España)



CONTENIDO

	Pág
Plenarias Internacionales	
Redes poliméricas y nanoestructuras para el diseño de materiales funcionales	14
Tailor Made Pincer Compounds	15
Síntesis asistida por microondas de electrocatalizadores para celdas de combustible	16
"Biosensores y emprendedorismo tecnológico universitario: más allá del academicismo monodisciplinar y la evaluación entre pares"	17
Upconversion: Odyssey	18
Desarrollo tecnológico en el área de materiales	19
Sistemas organizados "inteligentes" y su aplicación en nanociencia	20
Síntesis húmeda de óxido de zinc: controlando su morfología y emisión de luz	21
Las técnicas electroquímicas como alternativa para la caracterización de sistemas supramoleculares	22
Cyclometalated complexes: From catalysis to anticancer therapy	23
Diseño y caracterización de sistemas organizados orientados a la química sostenible y a la nanobiotecnología	24
Plenarias Nacionales	
Luminiscencia persistente en aplicaciones biomédicas: Desarrollo de nanofósforos de CaS:Eu ^{2+/} Dy ³⁺	26
Ingeniería de superficies de electrodo modificadas mediante materiales poliméricos responsivos y nano- partículas metálicas	27
"Género Renealmia: nuevas especies por investigar en el departamento del Quindío"	28
Nano-bioengineered tools for diseases diagnostic and therapeutic	29
Más allá de las baterías: Una alternativa de alimentación de <i>Wearable Devices</i> a través de la recuperación de calor	30
Nanoencapsulación de péptidos bioactivos y su actividad frente a bacterias patógenas	31
Graphene oxide multilayers from bamboo: Synthesis, properties and potential applications in electronics	32
Encapsulamiento de fármacos en nanofibras de PVAL-OH, y estudios de la cinética de liberación en un medio líquido utilizando espectroscopia Uv-vis	33
La importancia de los polinizadores en la biodiversidad: La abeja como indicador ambiental	34
Observación del ferromagnetismo a la nanoescala: Microscopia Lorentz y holografía electrónica	35
Intoxicación por metales pesados (una muerte poco percibida)	36
Nanobiotecnología para el tratamiento de cáncer	38
Nuevos materiales inspirados en sistemas bioinorgánicos	39
LA CIDRA UNA MATRIZ VEGETAL DESCONOCIDA	40
Analítica y ambiental	
$\begin{tabular}{ll} Valorización de ${\rm CO}_2$ por conversión electrocatalítica con catalizadores bimetálicos usando como soporte grafeno \end{tabular}$	42
Evaluación del potencial de limpieza de muestras de carbón con alto contenido de materia mineral a partir de una columna de flotación	43
Limpieza de carbón a partir de una columna de flotación	44
Transformación de los residuos de baterías níquel hidruro metálico en aleaciones base aluminio empleando un procedimiento de fundición reactiva	45
Aplicación de la metodología de superficie de respuesta para la remoción de colorantes en aguas residuales industriales con carbón de llanta como adsorbente	46

Biocarbón de cáscara de naranja: Una alternativa sustentable para la remoción de colorantes de aguas residuales de la industria textil	47
Adsorción de cromo (VI) sobre biomasa seca en polvo de Eichhornia crassipes	48
Caracterización fisicoquímica y microbiológica de aguas mieles del beneficio del café	49
Materiales compuestos residuales con aplicaciones en la industria de la construcción	50
Determinación de trihalometanos en aguas de piscinas por cromatografía de gases con detector de microcaptura de electrones	51
Determinación de triclosán por sorción en disco rotatorio en muestras de agua utilizando montmorillonita intercalada con líquidos iónicos como fase absorbente	52
Extracción de cafeína de aguas mieles del beneficio del café a través de solventes supramoleculares	53
Biochemical conversion of sugarcane bagasse lignin to lipids	54
Obtención de biocarbón de cáscaras de banano para la remoción de colorantes	55
Bio-nanocompositos y sus potenciales aplicaciones en la remoción de contaminantes orgánicos	56
Obtención de un adsorbente para la retención de oro preparado a partir de residuos forestales	57
Bioremedación de progesterona mediante la biomasa residual de la microalga <i>Chlorella sp.</i> , después de la extracción de lípidos	58
Proyecto mercurio cero: Remoción de mercurio mediante electrocoagulación, en muestras de agua del río arzobispo cuenca media	59
Degradación del colorante rojo ponceau mediante CWHPO empleando arcillas pilarizadas con Al-Fe	60
Efecto de la exposición a metales pesados (cadmio) en la respuesta metabólica de las hojas, tallos y raíces de <i>Lupinus bogotensis</i>	61
Caracterización microquímica de las fases inorgánicas encontradas en carbones vegetales obtenidos a partir de la pirolisis de residuos de poda y jardinería	62
Caracterización de las fases escoria y metal que se forman al poner en contacto aluminio líquido con los ánodos ricos en zinc extraídos de baterías alcalinas desechadas	63
Fabricación de pigmentos inorgánicos basados en óxidos de níquel y cobalto recuperados a partir de baterías domésticas gastadas y su aplicación en esmaltes cerámicos	64
Formulación de un plan para el manejo y disposición de residuos de asbesto en la institución educativa rural Vijagual	65
Evaluación preliminar de materiales no convencionales para el tratamiento pasivo de drenajes ácidos de minería y su aplicación en una celda biogeoquímica a escala de laboratorio	66
Desarrollo de un diseño experimental 2 ³ para evaluar rendimientos de pretratamientos oxidativos sobre biomasas lignocelulósicas	67
Obtención de fósforo asimilable a partir de roca fosfórica usando ácidos orgánicos de bajo peso molecular para el aprovechamiento en fertilizantes	68
Desarrollo de sensores basados en redes orgánicas covalentes y redes metal-orgánicas para la detección de amoniaco y de aminas de bajo peso molecular	69
Alternativa de biorremediación a partir de residuos de cacao en la obtención de hongos <i>Pleurotus ostreatus</i> con la implementación de un análisis multicriterio	70
Evaluación de la biomasa vegetal (cereza) de café como sustrato para el cultivo de hongos <i>Pleurotus ostreatus</i>	71
Síntesis de nanofibras de celulosa a partir de plátano y su aplicación en la remoción de colorantes	72
Análisis fisicoquímico y de residuos de neonicotinoides en miel de abejas producida en el Quindío, Colombia	73
Análisis de residuos de fipronil, clorpirifos y organoclorados en miel de abejas (<i>Apis mellifera</i>) producida en el Quindío, Colombia	74
Elaboración de películas a partir de aceite de higuerilla	75
Remoción de fósforo en agua usando el material híbrido quitosano-2-mica	76





Evaluación de parámetros fisicoquímicos en la cáscara de Sacha Inchi (<i>Plukenetia volubilis</i>) para el aprovechamiento agroambiental Extracción de almidón de cáscara de cacao <i>Theobroma cacao</i> L. Como alternativa de bioprospección Adaptación de la norma ASTM D5002 para la medición de la densidad de petróleos crudos extrapesados Caracterización de las aguas de formación asociadas a la producción de crudos extrapesados Estudio de la reacción entre etilendiamina y diferentes iones diazónio, obtención de nuevos compuestos triazenos y pentaazadienos. Posible uso de estas moléculas para la formación de complejos de mercurio(II) Nano-sensor óptico basado en puntos cuánticos hidrofóbicos de CdSe/ZnS-ácido oleico para la detección de iones mercurio en fase heterogénea Nano-sensor óptico basado en puntos cuánticos hidrofílicos de CdSe/ZnS-glutatión para la detección de iones mercurio en fase homogénea Química y física cuántica: Teoría cuántica: Los paneles solares, el modelo atómico de Bohr y espectros a la llama de elementos químicos. Propiciando desarrollo de competencias científicas en 10° Docking molecular de un péptido biomarcador con proteínas receptoras para la evaluación de alteraciones de la barrera hematoencefálica ONIOM para el estudio de sistemas supramoleculares: Caso energías de interacción entre nanotubos de carbono y aminoácidos Screening virtual de fármacos como potenciales precursores de agentes liberadores de monóxido de carbono Reposicionamiento de fármacos en la identificación de inhibidores potenciales de la del sistema quorum sensing de Pseudomonas aeruginosa Ciencia y tecnología de alimentos	77 78 79 80 81 82 83 85 86 87 88
Adaptación de la norma ASTM D5002 para la medición de la densidad de petróleos crudos extrapesados Caracterización de las aguas de formación asociadas a la producción de crudos extrapesados Estudio de la reacción entre etilendiamina y diferentes iones diazónio, obtención de nuevos compuestos triazenos y pentaazadienos. Posible uso de estas moléculas para la formación de complejos de mercurio(II) Nano-sensor óptico basado en puntos cuánticos hidrofóbicos de CdSe/ZnS-ácido oleico para la detección de iones mercurio en fase heterogénea Nano-sensor óptico basado en puntos cuánticos hidrofílicos de CdSe/ZnS-glutatión para la detección de iones mercurio en fase homogénea Química y física cuántica Teoría cuántica: Los paneles solares, el modelo atómico de Bohr y espectros a la llama de elementos químicos. Propiciando desarrollo de competencias científicas en 10° Docking molecular de un péptido biomarcador con proteínas receptoras para la evaluación de alteraciones de la barrera hematoencefálica ONIOM para el estudio de sistemas supramoleculares: Caso energías de interacción entre nanotubos de carbono y aminoácidos Screening virtual de fármacos como potenciales precursores de agentes liberadores de monóxido de carbono Reposicionamiento de fármacos en la identificación de inhibidores potenciales de la del sistema quorum sensing de Pseudomonas aeruginosa	79 80 81 82 83 85 86 87
Caracterización de las aguas de formación asociadas a la producción de crudos extrapesados Estudio de la reacción entre etilendiamina y diferentes iones diazónio, obtención de nuevos compuestos triazenos y pentaazadienos. Posible uso de estas moléculas para la formación de complejos de mercurio(II) Nano-sensor óptico basado en puntos cuánticos hidrofóbicos de CdSe/ZnS-ácido oleico para la detección de iones mercurio en fase heterogénea Nano-sensor óptico basado en puntos cuánticos hidrofílicos de CdSe/ZnS-glutatión para la detección de iones mercurio en fase homogénea Química y física cuántica Teoría cuántica: Los paneles solares, el modelo atómico de Bohr y espectros a la llama de elementos químicos. Propiciando desarrollo de competencias científicas en 10° Docking molecular de un péptido biomarcador con proteínas receptoras para la evaluación de alteraciones de la barrera hematoencefálica ONIOM para el estudio de sistemas supramoleculares: Caso energías de interacción entre nanotubos de carbono y aminoácidos Screening virtual de fármacos como potenciales precursores de agentes liberadores de monóxido de carbono Reposicionamiento de fármacos en la identificación de inhibidores potenciales de la del sistema quorum sensing de Pseudomonas aeruginosa	80 81 82 83 85 86 87
Estudio de la reacción entre etilendiamina y diferentes iones diazónio, obtención de nuevos compuestos triazenos y pentaazadienos. Posible uso de estas moléculas para la formación de complejos de mercurio(II) Nano-sensor óptico basado en puntos cuánticos hidrofóbicos de CdSe/ZnS-ácido oleico para la detección de iones mercurio en fase heterogénea Nano-sensor óptico basado en puntos cuánticos hidrofílicos de CdSe/ZnS-glutatión para la detección de iones mercurio en fase homogénea Química y física cuántica Teoría cuántica: Los paneles solares, el modelo atómico de Bohr y espectros a la llama de elementos químicos. Propiciando desarrollo de competencias científicas en 10° Docking molecular de un péptido biomarcador con proteínas receptoras para la evaluación de alteraciones de la barrera hematoencefálica ONIOM para el estudio de sistemas supramoleculares: Caso energías de interacción entre nanotubos de carbono y aminoácidos Screening virtual de fármacos como potenciales precursores de agentes liberadores de monóxido de carbono Reposicionamiento de fármacos en la identificación de inhibidores potenciales de la del sistema quorum sensing de Pseudomonas aeruginosa	81 82 83 85 86 87
triazenos y pentaazadienos. Posible uso de estas moléculas para la formación de complejos de mercurio(II) Nano-sensor óptico basado en puntos cuánticos hidrofóbicos de CdSe/ZnS-ácido oleico para la detección de iones mercurio en fase heterogénea Nano-sensor óptico basado en puntos cuánticos hidrofílicos de CdSe/ZnS-glutatión para la detección de iones mercurio en fase homogénea Química y física cuántica Teoría cuántica: Los paneles solares, el modelo atómico de Bohr y espectros a la llama de elementos químicos. Propiciando desarrollo de competencias científicas en 10° Docking molecular de un péptido biomarcador con proteínas receptoras para la evaluación de alteraciones de la barrera hematoencefálica ONIOM para el estudio de sistemas supramoleculares: Caso energías de interacción entre nanotubos de carbono y aminoácidos Screening virtual de fármacos como potenciales precursores de agentes liberadores de monóxido de carbono Reposicionamiento de fármacos en la identificación de inhibidores potenciales de la del sistema quorum sensing de Pseudomonas aeruginosa	82 83 85 86 87
de iones mercurio en fase heterogénea Nano-sensor óptico basado en puntos cuánticos hidrofílicos de CdSe/ZnS-glutatión para la detección de iones mercurio en fase homogénea Química y física cuántica Teoría cuántica: Los paneles solares, el modelo atómico de Bohr y espectros a la llama de elementos químicos. Propiciando desarrollo de competencias científicas en 10° Docking molecular de un péptido biomarcador con proteínas receptoras para la evaluación de alteraciones de la barrera hematoencefálica ONIOM para el estudio de sistemas supramoleculares: Caso energías de interacción entre nanotubos de carbono y aminoácidos Screening virtual de fármacos como potenciales precursores de agentes liberadores de monóxido de carbono Reposicionamiento de fármacos en la identificación de inhibidores potenciales de la del sistema quorum sensing de Pseudomonas aeruginosa	83 85 86 87 88
Química y física cuántica Teoría cuántica: Los paneles solares, el modelo atómico de Bohr y espectros a la llama de elementos químicos. Propiciando desarrollo de competencias científicas en 10° Docking molecular de un péptido biomarcador con proteínas receptoras para la evaluación de alteraciones de la barrera hematoencefálica ONIOM para el estudio de sistemas supramoleculares: Caso energías de interacción entre nanotubos de carbono y aminoácidos Screening virtual de fármacos como potenciales precursores de agentes liberadores de monóxido de carbono Reposicionamiento de fármacos en la identificación de inhibidores potenciales de la del sistema quorum sensing de Pseudomonas aeruginosa	85 86 87 88
Teoría cuántica: Los paneles solares, el modelo atómico de Bohr y espectros a la llama de elementos químicos. Propiciando desarrollo de competencias científicas en 10° Docking molecular de un péptido biomarcador con proteínas receptoras para la evaluación de alteraciones de la barrera hematoencefálica ONIOM para el estudio de sistemas supramoleculares: Caso energías de interacción entre nanotubos de carbono y aminoácidos Screening virtual de fármacos como potenciales precursores de agentes liberadores de monóxido de carbono Reposicionamiento de fármacos en la identificación de inhibidores potenciales de la del sistema quorum sensing de Pseudomonas aeruginosa	86 87 88
químicos. Propiciando desarrollo de competencias científicas en 10° Docking molecular de un péptido biomarcador con proteínas receptoras para la evaluación de alteraciones de la barrera hematoencefálica ONIOM para el estudio de sistemas supramoleculares: Caso energías de interacción entre nanotubos de carbono y aminoácidos Screening virtual de fármacos como potenciales precursores de agentes liberadores de monóxido de carbono Reposicionamiento de fármacos en la identificación de inhibidores potenciales de la del sistema quorum sensing de Pseudomonas aeruginosa	86 87 88
nes de la barrera hematoencefálica ONIOM para el estudio de sistemas supramoleculares: Caso energías de interacción entre nanotubos de carbono y aminoácidos Screening virtual de fármacos como potenciales precursores de agentes liberadores de monóxido de carbono Reposicionamiento de fármacos en la identificación de inhibidores potenciales de la del sistema quorum sensing de Pseudomonas aeruginosa	87
carbono y aminoácidos Screening virtual de fármacos como potenciales precursores de agentes liberadores de monóxido de carbono Reposicionamiento de fármacos en la identificación de inhibidores potenciales de la del sistema quorum sensing de Pseudomonas aeruginosa	88
carbono Reposicionamiento de fármacos en la identificación de inhibidores potenciales de la del sistema quorum sensing de Pseudomonas aeruginosa	
sensing de Pseudomonas aeruginosa	89
Ciencia y tecnología de alimentos	
Aprovechamiento de la malta agotada proveniente de la industria cervecera para la elaboración de una bebida láctea con alto contenido proteico	91
Efecto del ultrasonido sobre las propiedades interfaciales del okara de soja	92
Evaluación de la capacidad antioxidante y contenido fenólico de las frutas de maracuyá, lulo, uva y cidra	93
Extracción de cafeína a partir de pulpa de café (Coffea arabica) empleando agua como solvente verde	94
Estudio de transferencia de masa en la preparación de las bebidas de café frías	95
Evaluación del reemplazo de la sacarosa en un concentrado de mango empleando jarabe de yacón (Smallanthus sonchifolius)	96
Estrategias de complejación en medio ácido de concentrados proteicos de suero de soja y polisacáridos solubles de soja para la preparación de emulsiones O/W estables a la congelación/descongelación	97
Emulsiones ácidas símil-aderezo preparadas con suero de tofu concentrado	98
Hierro no hémico obtenido de la ortiga para fortificación de productos de panadería	99
Nanoencapsulamiento del colorante natural extraído a partir de la cáscara del fruto <i>Patinoa almirajó Cuatrec</i> (PAC)	100
Development of oil-in-water nanoemulsions to enhance the bioavailability of lycopene	101
Aplicación de las técnicas z-scan y libs para el análisis de aceites de oliva	102
Utilización de okara de nuez en la elaboración de panificados libres de gluten	103
Identificación de compuestos de aroma presentes en el aceite de Sacha inchi (<i>Plukenetia volubilis L.</i>) por HS-SPME-GC-MS-O	104
Obtención de una bebida a base de maíz morado (Zea mays L.)	105
Caracterización físico-química, fisiológica y eléctrica del proceso de maduración del banano Gros michael (<i>Musa acuminata AAA</i>)	106
Caracterización físico-química, fisiológica y eléctrica en el momento de cosecha del banano Gros Michael (<i>Musa acuminata AAA</i>)	107
Desarrollo de emulsiones tipo "pickering" utilizando almidón nativo de arracacha como agente estabilizante	108

Síntesis y caracterización de almidones modificados mediante fosforilización	109
Extracción de pectina obtenida a partir de pulpa de cidra Sechium edule (Jacq.) Sw	111
Aplicación de un sistema de visión artificial (SVA) para el análisis del color de la carne de bovino en tiempo real	111
Optimización de la formulación de una pasta alimenticia con quinua y almidón de yuca, aplicando la metodología de superficie de respuesta (MSR)	112
Caracterización morfológica, estructural y térmica de microfibras de celulosa aisladas de residuos agroindustriales	113
Obtención y caracterización de una película plástica a base de almidón funcionalizado	114
Caracterización química, fisicoquímica, térmica y estructural de la harina extraída de tres variedades de arracacha (<i>Arracacia xanthorrhiza</i>)	115
Estabilidad en almacenamiento de un bioinsumo para control <i>in-vitro</i> de <i>Ralstonia solanacearum</i> , causante de la enfermedad de moko en plátano	116
Selección del mejor diseño experimental y el mejor parámetro estimado de germinación en experimentos con estimulación magnética en semillas de maíz	117
Evaluación de la huella hídrica y valor nutricional de comidas representativas de las regiones naturales de Colombia	118
Efecto de la adición de crio-conservantes en las propiedades reológicas de purés de papa criolla (<i>Solanum phureja</i>)	119
Biosorción de cromo (IV) empleando levadura <i>Sacharomyces cerevisiae</i> inmovilizada sobre cáscara de cidra <i>Sechium edule</i> (Jacq.) sw.	120
Efecto de la adición de hidrocoloides en la elaboración de espumas alimentarias a base de lulo y pimentón	121
Nanomateriales	
Evaluation of the synthesis route of NiO@Carbon quantum dots Janus nanocomposites on their photocatalytic properties for organic molecules degradation in oil/water emulsions	123
Nitrogen-doped carbon quantum dots supported on paramagnetic iron-doped hydroxyapatite nanocomposites as photocatalyst for dye degradation in aqueous solution under visible light	124
Evaluación de la estabilidad de sistemas almidón-nanopartículas de plata. Efecto de del tipo de almidón	125
Nanocompositos polímero-oro: Preparación, caracterización y remoción de contaminantes	126
Quitosano funcionalizado con óxido de grafeno para la síntesis de andamios con aplicación en ingeniería de tejidos	127
Recubrimientos anticorrosivos híbridos orgánico – inorgánico de SiO2 producidos vía sol – gel	128
Nanopartículas magnéticas modificadas con ácido tánico como adsorbente de cadmio(II) en medio acuoso	129
Estudio sobre la caracterización eléctrica de una membrana de intercambio protónico compuesta por poliacetato de vinilo (PVAc) y acido hipofosforoso (H3PO2) usada en una celda combustible	130
Estudio experimental del efecto del indio sobre el sistema de Fe3Sn	131
Estudio de las propiedades estructurales y magnéticas del sistema Pr1-xSrxMnO3 $(0.1 \le X \le 5)$ obtenidas a partir del método de precursor polimérico	132
Efecto del quitosano de bajo y medio peso molecular en la obtención de nanopartículas metálicas estables	133
Síntesis y caracterización de una nueva bishidrazona de fluoresceína y sus complejos con Zn2+: Estudio comparativo de sus espectros de emisión y absorción	134
Síntesis y caracterización de membranas a base de silicalita y polidimetilsiloxano	135
Síntesis y caracterización de un recubrimiento comercial funcionalizado con óxido de grafeno	136
Modificación de la porosidad en aerogeles de óxido de grafeno mediante decorado con nanopartículas de turmalina	137
Ruta de obtención del compuesto helimagnético tipo perovskita SrFeO3-x orientado hacia estudios de transporte espintrónico	138





Síntesis, caracterización fisicoquímica y propiedades piezoresistivas de un elastómero basado en polidimetilsiloxano modificado con nanopartículas de plata	139
Carbon nanotubes and graphene promote pyrolysis of free-base phthalocyanine	140
Performance enhancement of Al/CuO nanolaminates by incorporation of Cu and ZnO nanolayers at the interfaces	141
Efecto de la aplicación de los campos magnéticos sobre las propiedades eléctricas del sistema de PVOH + Co ₃ O ₄ , mediante el uso de espectroscopia de impedancia compleja (IS) a altas temperaturas	142
Estudio de la estructura de bandas a través de XPS de películas delgadas de SnO2 depositadas por ALD: Compatibilidad como capa transportadora de electrones en celdas solares	143
Extracción de sílice y celulosa como aprovechamiento integral de la cascarilla de arroz	144
Caracterización de nuevos nanomateriales híbridos con las técnicas SEM – EDS, XPS y TGA para aplicaciones en procesos de recobro mejorado	145
Producción y caracterización estructural y magnética de nanocristales de óxido de cobre con gran contenido de Fe	146
Síntesis y caracterización óptica y eléctrica de ZnS y ZnS dopado con cobre	147
Propiedades electroquímicas y fotofísicas de una nueva metalorejilla supramolecular de zinc [2x2]	148
Síntesis, propiedades estructurales y ópticas de nanopartículas de ZnO dopadas con MgO	149
Diseño y fabricación de nanoestructuras de alúmina y su evaluación como nanocontenedor hidrofóbico inteligente	150
Bio-compositos constituidos de nanocelulosa fibrilada y copolímeros en base a HEMA: Preparación y potencial aplicación para la sorción de azul de metileno	151
Simulación nanotecnológica en recubrimientos hidrofóbicos utilizando compuestos ordinarios para la enseñanza – aprendizaje de la química en la formación profesional integral del Sena	152
Estudio del fenómeno de conmutación resistiva en dispositivos tipo capacitor basados en óxidos multifuncionales	153
Efecto de la aplicación de ultrasonido en la síntesis de estructuras tridimensionales de óxido de grafeno mediante el método de autoensamblaje in-situ	154
Preparación y estabilidad del nanorefrigerante a base de nanopartículas de alofán sintético y propilenglicol	155
Estudio termoeléctrico sobre la aplicación de una membrana polimérica de conducción protónica compuesta por PVOH + H3PO4 en una celda combustible funcionando hasta los 50 $^{\circ}$ C	156
Evaluación de la obtención de una solución coloidal de nanopartículas hierro zero valente usando extractos vegetales para remediación de aguas residuales de procesos industriales	157
Estudio del efecto del Si en el sistema Fe3Sn	158
Síntesis hidrotérmica de nanoestructuras de carbono fluorescentes (NC) a partir de avena en hojuelas	159
Biosynthesis of silver nanoparticles from Arctium lappa and its antifungal activity against Phytophthora infestans and Alternaria	160
Encapsulamiento de curcumina en nanofibras de PVAL-OH, mediante la técnica de electrospining	161
Estudio de la adsorción de iones metálicos de cromo y plomo en solución acuosa mediante el uso de membranas modificadas con nanopartículas	162
Localización electrónica en sistemas cuasi-unidimensionales: Una aplicación al ADN	163
Localización de carga en una monocamada de grafeno: El papel de las vacancias sobre la polarización de la red	164
Formulación y caracterización de nanosuspensiones de resveratrol para administración ocular en el tratamiento de retinopatía diabética	165
Desarrollo de nano-bioconjugados basados en nanopartículas de oro y hebras de adn para amplificación de la señal en biosensado	166
Chemical and morphological analysis of rGO/ZnO composites obtained by microwave-assisted hydrothermal method	167

Desarrollo de nanopartículas de óxido de titanio funcionalizadas con curcumina	168
Síntesis y caracterización de nanopartículas magnéticas funcionalizadas con curcumina	169
Pressure-induced ferroelectric behavior in the BaWO4 oxide	170
A- and B-sites effect in the ferroelectric behavior of ABF4 materials	171
Obtención, estudios estructurales y magnéticos de nanopartículas de óxidos de hierro con propiedades biocompatibles	172
Efecto de la concentración de plata adicionada a nanopartículas de dióxido de titanio inoculadas en semillas de espinaca (Spinacia oleracea l)	173
Modelo Lego – Arduino para ilustrar los principios básicos de la microscopía de fuerza atómica en estudiantes de secundaria	174
Simulación de microscopía de fuerza de piezorespuesta por excitación de bandas (BE-PFM), detección de ruido y corrimiento en la frecuencia de resonancia a través de la descomposición en valores singulares (SVD)	175
Acoplamiento de Ir (III) y Fe (II) al compuesto aril tetralin lignano podofilotoxina	176
Estudio cinético y termodinámico de la degradación fotocatalítica de luminol utilizando puntos cuánticos de CdSe/ZnS	177
Síntesis y caracterización de puntos de carbono obtenido a partir de métodos ecológicos	178
Síntesis y caracterización de nanopartículas de oro con L-cisteína	179
Nanocomposites of YBCO-BZO and YBCO-BYTO deposited on CZO/YSZ substrates for coated conductors	180
Variation of structural and hyperfine parameters of (Fe0.70Al0.30)1-xNbx, with $x = 0, 0.05, 0.10$ and 0.20 system obtained by mechanical alloying	181
Síntesis de nanopartículas de plata depositadas in-situ en disilicato de litio para su uso como catalizador	182
Actividad fotocatalítica de películas de TiO2 dopadas con no metales utilizando la técnica Sol-gel	183
Effect of potential, substrate and alkaline treatment on the Ca/P molar ratio of calcium-deficient hydroxyapatite	184
A preliminary study of Fe oxides doped with Ba, Co, Cu and synthesized by polymerization with carboxylic acid	185
De fibras de fique a nanomateriales funcionales: hidrogeles basados en nanofibras celulósicas y nanopartículas metálicas	186
Estudio de las propiedades estructurales, morfológicas y eléctricas de películas delgadas de CeO2 dopadas con Nd depositadas por pulverización catódica asistida por radiofrecuencia	187
Nanopartículas sintetizadas a partir de óxidos metálicos funcionalizados con ligantes quirales	188
Extracción dinámica de hidrocarburos aromáticos polinucleares usando una interface on-line HPLC/SPME	189
Functionalization of magnetite nanoparticles with carboxymethyl cellulose and ethyl cellulose for dewatering of Colombian crude oils	190
Síntesis y caracterización de nanopartículas de oro con L-glutatión para la detección de mercurio	191
Síntesis verde asistida por microondas de puntos de carbono a partir de maracuyá	192
Structural and optical properties of quantum dots of CdSe/ZnS with different composition and their capacity for mercury detection	193
Estudio de las propiedades optoelectrónicas en multicapas de óxidos de grafeno (MOG) y multicapas óxidos de grafeno reducidos (MOGR)	194
Nanobiotecnología y nanomedicina	
Potenciación del efecto antibacteriano de péptidos catiónicos vehiculizados dentro de nano-liposomas funcionalizados con polímeros	196
Efecto del bioconjugado de péptido Ib-M1 en nanopartículas magnéticas de óxido de hierro (IONP@ IbM1) sobre el perfil proteico de Escherichia coli O157:H7	197





Encapsulamiento de curcumina en niosomas modificados con β- ciclodexrinas, para evaluación de actividad antioxidante	198
Crecimiento de nanofibras de PVAL-OH utilizando la técnica de electrohilado, encapsulamiento de ibuprofeno y su cinética de liberación en un medio líquido	199
Nanopartículas de óxido de hierro como biomarcadores para la evaluación de lesiones intracraneales	200
Desarrollo de una vacuna liposomal molecularmente definida contra la leishmaniasis cutánea: formulación, caracterización y prueba de eficacia preclínica	201
Encapsulamiento de glibenclamida en nanofibras de PVAL-OH, obtenidas mediante la técnica de electrospining	202
Diseño y síntesis de un marcador fluorescente basado en nanoclusters de oro (AuNC) con aplicaciones en bioimágenes de Staphylococcus aureus resistente a meticilina (SARM)	203
Membranas construidas a partir de PVA modificado iónicamente con MgCl2 para posible aplicación en tejido de piel	204
Preparación de nanopartículas de óxidos de hierro para la inmovilización del péptido antimicrobiano Ib-M2 y evaluación de su actividad contra E. coli O157:H7	205
Estudio de la afinidad de un péptido-ligando a sus posibles receptores, como biomarcador para la evaluación se alteraciones moleculares de la barrera hematoencefálica	206
Biosíntesis de nanopartículas de hierro a partir de drenajes ácidos de mina de carbón	207
Photosensitive nanobioconjugates for specific delivery of dofetilide into cardiac cells	208
Agentes antimicrobianos multidireccionales nanoestructurados basados en Ag0: Síntesis, caracterización y modulación de sus propiedades hemolíticas	209
Síntesis de nanopartículas de plata y su actividad bactericida en función del tamaño y estado de agregación	210
Potencial aplicación de bionanocompósito elaborado a partir de fibras de fique y nanopartículas metálicas en la degradación de colorantes provenientes de la industria textil	211
Espectroscopía RAMAN intensificada por efecto de superficie del nanocomposito de óxido de grafeno- nanopartículas de plata para la detección de vaprotide	212
Establecimiento de las condiciones para la obtención de sistemas nanoestructurados empleando polietilenglicol-b-poli(ε-caprolactona) (PEG-b-PCL)	213
Establecimiento de las condiciones para la obtención de sistemas nanoestructurados empleando quitosano, con aplicación en el desarrollo de soluciones irrigadoras para endodoncia	214
Genosensores para el diagnóstico de infecciones virales transmitidas por mosquitos	215
Desarrollo de un recubrimiento polimérico nanoreforzado con capacidad de repeler cargas eléctricas negativas y su aplicación en el tratamiento de la enfermedad aterosclerótica	216
Encapsulamiento de extracto de Passiflora edulis en nanofibras de PVAL-OH, utilizando la técnica de electrohilado, y cinética de liberación	217
Fisicoquímica y electroquímica	
Proposal of a dependent temperature potential for molecular dynamics in the PbF2	219
Chlorophyll measurement by spectroscopy and its behavior to different nitrogen levels	220
Desempeño de electrodos de hierro y aluminio en el tratamiento de emulsiones O/W mediante un proceso discontinuo de electrocoagulación	221
Quantitative structure-activity relationships of the anticancer activity of 5-(pyridin-4-yl) substituted 1,3,4-oxadiazoles, 1,3,4-thiadiazoles, and 1,2,4-triazoles	222
Experimental setup of PFAL using LED for high protein food production	223
Caracterización voltamperométrica del carácter hidrofilico -lipofilico de materiales metálicos en micro-emulsiones O/W	224
QSAR study of antifungal agents containing the piperidine, 1,2,3-triazole, and 1,2,4-oxadiazole cores	225
QSAR study of the antifungal activity of piperazine substituted 1,2,4-triazoles	226
Electrodos serigrafiados de azul de prusia modificados con óxido de grafeno y peroxidasa de pasto guinea (Panicum Maximum) para detección electroquímica de Staphylococcus Aureus	227

Detección rápida de Staphylococcus aureus usando un biosensor electroquímico de electrodos serigrafiados de oro modificados con cisteína y peroxidasa de pasto guinea (Panicum maximum)	228
Diseño, estudio teórico y correlación de las propiedades electrónicas y ópticas de derivados de benzodi- etiniltiofenos como potenciales celdas fotovoltaicas	229
Evaluación del desempeño eléctrico de una celda de combustible de metanol directo no comercial	230
Tautomeric equilibria in β-ketonitriles: Computational thermodynamics and kinetics	231
Estudio de aductos fullerénicos a partir de ésteres malónicos de trietilenglicol y C60: propiedades electrónicas y electroquímicas	232
Estudio computacional de la descomposición térmica de algunos compuestos del tipo oxi-propenos	233
Evaluación de los genes que codifican para Hsp (Heat Shock Protein) en plántulas de arroz	234
Computational study of the keto-enol tautomerism in β-ketoamides	235
Seguimiento electroquímico de la degradación oxidativa de glifosato con UV/H2O2	236
Crecimiento de nanofibras PVAL-OH, para el encapsulamiento de aceite esencial de Cúrcuma longa utilizando electrohilado	237
Análisis voltamétrico de diclofenaco con electrodos de grafito químicamente modificados	238
Electrosíntesis y caracterización de películas delgadas de MOF sobre diversos substratos y evaluación de las mismas en la detección de amoniaco	239
Modificación superficial de láminas de acero mediante la técnica de oxidación electrolítica con plasma para aplicaciones en procesos de oxidación avanzada	240
Síntesis y caracterización de nanopartículas de óxido de zinc funcionalizadas con curcumina	241
Síntesis y caracterización electroquímica de electrodos de carbón vítreo modificados con óxido de grafeno y nanopartículas de oro	242
Cuantificación de acetaldehído con un biosensor fabricado con nanotubos de carbono y tionina	243
Influencia de los principales parámetros de deposición electroforética sobre el espesor teórico de recubrimientos de Al2O3 sobre barras de grafito	244
Determinación voltamperométrica de glucosa en café pergamino húmedo como parámetro de calidad	245
Estabilidad electroquímica de recubrimientos compuestos por nanopartículas de quitosano sobre titanio obtenidos mediante deposición electroforética	246
Síntesis y caracterización de nanopartículas de quitosano, quitosano-PLGA, quitosano-PEI	247
Química orgánica y productos naturales	
Síntesis tricomponente de nuevos espirooxindoles	249
Uso de la cicloadición azida-alquino catalizada por cobre (química click) en la obtención de un péptido quimérico antibacteriano derivado de la lactoferricina bovina y la buforina II	250
Rastreo exploratorio de la flexibilidad química endógena vegetal mediante metabotipificación por LC-MS: Un enfoque quimioprospectivo	251
Aislamiento de microorganismos termófilos productores de enzimas de importancia agroindustrial	252
Finding the hiding treasure on sugarcane: Lignin	253
Evaluación de los perfiles cromatográficos de fitoterapéuticos a base de alcachofa (Cinara scolymus) y caléndula (Caléndula officinalis)	254
Síntesis y estudios electrónicos de nuevos pigmentos orgánicos basados en BODIPY y triarilaminas para su aplicación en celdas solares sensibilizadas por pigmentos	255
Síntesis, caracterización, ensayos de solubilidad y velocidad de disolución de sales de nafazolina para mejorar su biodisponibilidad	256
Preparation and crystallographic characterization of naphazoline succinate	257
Estudio polimórfico de la trimebutina maleato obtenido a diferentes condiciones de cristalización	258
Estudio de las interacciones del peptido Alyteserin 1C y de un análogo sobre modelos de membranas	259
Development of stable nanoemulsiones of S-(-)-limonene using ultracavitation	260





Síntesis de nuevos híbridos sulfonamida-chalcona y sulfonamida-pirazolina derivados de la 4-metoxiacetofenona	261
Perspectives on the biomedical use of the flavonol quercetin and its derivatives: A review on reported effects and gaps based on bioinformatics	262
Síntesis de nuevos transportadores de huecos (HTMs) basados en selenofeno para celdas solares de perovskita (PSCs)	263
Diseño, síntesis y evaluación biológica de nuevos híbridos tiazolil-pirazolina con mostaza nitrogenada	264
Síntesis de derivados de trifenilamina unidos al núcleo molecular BODIPY y evaluación de sus propiedades de transporte de carga	265
Evaluación de la actividad antibacteriana de hojas y tallos de Justicia Aurea (Acanthaceae)	266
Síntesis de ligandos del tipo 4-(alquilamino)pentan-2-ona y 4-(alquilamino)pent-3-en-2-ona a partir de 2-aminoácidos y su uso como posibles agentes quelatantes de iones metálicos	267
Síntesis de diacetato de gliceraldehído usando lipasa b de Candida antarctica inmovilizada sobre octilagarosa	268
Estudio por espectroscopia infrarrojo y resonancia magnética nuclear de 1H del equilibrio tautomérico imina-enamina en compuestos del tipo 3-(alquilamino)-1,3-disustituidoprop-2-en-1-ona	269
Crystal structure of mirabegron by X-Ray powder diffraction data	270
Identificación y análisis de metabolitos secundarios presentes en el extracto hexánico de la especie Ipomoea trifida (Convolvulaceae)	271
Búsqueda y aislamiento de metabolitos secundarios en fracciones polares del extracto total (partes aéreas) de Renealmia ligulata (Zingiberaceae)	272
Búsqueda y aislamiento de metabolitos secundarios y obtención del aceite esencial presente en los rizomas de Renealmia ligulata (Zingiberaceae)	273
Búsqueda y aislamiento de metabolitos secundarios en Mikania guaco (Asteraceae)	274
Estudio de la estructura cristalina de fexofenadina hidrocloruro, fexofenadina y análisis comparativo de solubilidad	275
Búsqueda de compuestos con actividad citotóxica en hojas de Sapium stylare (Euphorbiacea)	276
Corrección organoléptica de una emulsión cosmética de aceite de aguacate bajo los parámetros de "producto natural", mediante la microencapsulación de un aceite esencial y su uso como agente corrector	277
Búsqueda de metabolitos secundarios en fracciones polares del extracto total de Justicia secunda Vahl (Acanthaceae)	278
Síntesis one-pot y evaluación in sílico de amidas derivadas de 5-aminopirazoles como potenciales agentes anti-Toxoplasma gondii	279
Identificación de inhibidores polifuncionales de enzimas gástricas usando acoplamiento molecular y similitud de interacciones PLIF	280
Nuevas 4-tiazolidinonas como posibles inhibidores de la proteína murb de Porphyromonas gingivalis, un estudio in silico	281
Identificación de potenciales inhibidores polifuncionales de enzimas gástricas usando acoplamiento mo- lecular y huellas digitales de interacción ligando-proteína	282
Evaluación del efecto sinérgico de nanoemulsiones de limoneno y nanopartículas de plata como alternativa contra bacterias resistentes	283
Síntesis y evaluación de propiedades ópticas y electrónicas del derivado indol-acrilonitrilo para aplicación en materiales emisores	284
Síntesis de n-alcoxi-metil-aminas con aminas derivadas de bencidina mediante reacción tipo Mannich con alcoholes	285
Química inorgánica y catálisis	
Ulvöespinelas de TiFe2O4 y ZnFe2O4 obtenidas a partir de ablación láser con aplicaciones en salud ambiental	287
Fotodegradación de etilenglicol en aguas residuales a través del sistema heterogéneo foto – fenton	288

Síntesis de un complejo de enalaprilo con níquel y su estudio de solubilidad en medio acuoso	289
Superficies antimicrobianas de haluros metálicos inmovilizados sobre materiales poliméricos	290
Evaluación de las propiedades biocataliticas de nuevas lipasas extremófilas inmovilizadas en octil agarosa	291
Uso de CdS obtenido de residuos de laboratorio como fotocatalizador para la eliminación de antibióticos fluoroquinolonas en agua	292
Síntesis y caracterización de derivados n-heterociclos de azo- iminas, coordinación a rutenio y evaluación en reacciones de alquilación de metilcetonas	293
Síntesis de aminoésteres derivados de la glicina y sus compuestos de coordinación con níquel(II) y zinc(II) con posible actividad antimicrobiana	294
Aminoesteres y sus derivados con cobre(II), manganeso(II) y niquel(II) como potenciales antimicrobianos	295







REDES POLIMÉRICAS Y NANOESTRUCTURAS PARA EL DISEÑO DE MATERIALES FUNCIONALES

Facundo Altuna, ^a María S. Álvarez, ^a Julián Antonacci, ^b Gustavo F. Arenas, ^b Nancy Cativa, ^a Ignacio E. dell'Erba, ^a Cristina E. Hoppe, ^{a*} Julieta Puig, ^a Hernán Romeo, ^a Walter F. Schroeder, ^a Fernando Trabadelo, ^c v Roberto J. J. Williams ^a.

a División Polímeros Nanoestructurados – INTEMA, Av. J. B. Justo 4302, B7608FDQ Mar del Plata, Argentina.
 b Laboratorio LASER - ICYTE – UNMdP-CONICET, Av. J. B. Justo 4302, B7608FDQ Mar del Plata, Argentina.
 c Laboratorio de Electrónica-INTEMA (UNMdP/CONICET), J. B. Justo 4302, B7608FDQ Mar del Plata, Argentina.
 * Autor de correspondencia: hoppe@fi.mdp.edu.ar

Palabras Claves: Materiales funcionales; nanopartículas; efecto fototérmico; redes poliméricas entrecruzadas.

El diseño racional de un material funcional requiere conocer las propiedades fisicoquímicas de los componentes que lo constituyen y, a su vez, el tipo de interacciones y cambios que aparecen cuando se ponen en contacto entre ellos. A través de la cuidadosa selección de estos bloques de construcción, se han podido obtener materiales con grados cada vez más altos de sofisticación y complejidad con potenciales aplicaciones en áreas tecnológicas prioritarias, como las de energía, alimentos, medio ambiente, medicina, etc. Aunque claramente prometedores, estos resultados también han abierto nuevos interrogantes acerca de las posibilidades de procesamiento, escalado a nivel industrial y aplicabilidad real en función de los desafíos tecnológicos actuales. En la búsqueda de nuevas estrategias, las redes poliméricas entrecruzadas ofrecen una versatilidad notable, tanto por la variedad de características mecánicas y fisicoquímicas que pueden alcanzarse por selección apropiada de la química de síntesis, como por su posibilidad de procesamiento e integración con otros materiales. En esta charla se describirá el grado de avance de algunas de las líneas de investigación que actualmente se llevan a cabo dentro del grupo de Polímeros Nanoestructurados del INTEMA, relacionadas con el desarrollo de materiales funcionales basados en redes poliméricas entrecruzadas modificadas con nanoestructuras. En particular, se presentarán dos ejemplos: el diseño de materiales autorreparables activados de manera remota por irradiación con luz visible y la síntesis de nuevas plataformas bidimensionales para el micro-transporte de fluidos obtenidas por una nueva técnica de crio-fotopolimerización. Se describirán ambos casos en el marco de estrategias más generales del diseño de redes poliméricas y de las propiedades directamente asociadas con fenómenos en la nanoescala, como la fototermia de nanopartículas metálicas.



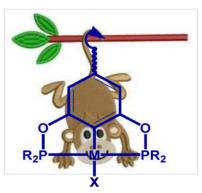


TAILOR MADE PINCER COMPOUNDS

David Morales-Morales a*

^a Instituto de Química. Universidad Nacional Autónoma de México Circuito Exterior S/N. Ciudad Universitaria. Coyoacán. C. P. ⁰⁴⁵¹⁰. CDMX. Mexico. *Corresponding author: damor@unam.mx

This talk will present relevant results on the design, synthesis and potential applications of Pincer ligands and their complexes, placing special emphasis in non-symmetric and "on the aromatic ring" functionalized pincer compounds.



References: (a) M. Asay, D. Morales-Morales. Top. Organomet. Chem. 54 (2016) 239. (b) M. Asay, D. Morales-Morales, Dalton Trans. 44 (2015) 17432. c) H. Valdes, L. González-Sebastián, D. Morales-Morales. J. Organomet. Chem. 845 (2017) 229. (d) D. Morales-Morales, C. M. Jensen, *The Chemistry of Pincer Compounds*, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2007. (e) D. Morales-Morales, Mini-Rev. Org. Chem., 5 (2008) 141; (f) J. M. Serrano-Becerra and D. Morales-Morales, Curr. Org. Synth., 6 (2009) 169; (g) D. Morales-Morales. (2009) Iridium-mediated alkane dehydrogenation. In: L. A. Oro, C. Claver. (eds) Iridium complexes in organic synthesis, 1st ed. Wiley-VCH, Weinheim, ch 13. (h) M. Albrecht, D. Morales-Morales. (2009) Pincer-type iridium complexes for organic transformations. In: L. A. Oro, C. Claver. (eds) Iridium complexes in organic synthesis, 1st ed. Wiley-VCH, Weinheim, Chap 12. (i) D. Morales-Morales. Rev. Soc. Quim. Mex. 48 (2004) 338. (j) D. Morales-Morales, H. Valdes, M. A. García-Eleno and D. Canseco-Gonzalez, ChemCatChem. 10 (2018) 3136 – 3172. (k) M. A. García-Eleno, E. Padilla-Mata, F. Estudiante-Negrete, F. Pichal-Cerda, S. Hernández-Ortega, R. A. Toscano, D. Morales-Morales. New. J. Chem. 2015 (39) 3361. (1) D. Morales-Morales, Pincer Compounds. Chemistry and Applications, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2018. (m) H. Valdés, J. M. Germán-Acacio, D. Morales-Morales. (2018) Strategies for the design and synthesis of pincer-based dendrimers: Potential applications. In: Alexandru M. Grumezescu (ed) Organic Materials as Smart Nanocarriers for Drug Delivery. 1st ed. Elsevier, Amsterdam ch 07. (n) H. Valdes, E. Rufino-Felipe, D. Morales-Morales J. Organomet. Chem. 898 (2019) 120864. (o) L. Gonzalez-Sebastian, D. Morales-Morales. J. Organomet. Chem. 893 (2019) 39-51.

SÍNTESIS ASISTIDA POR MICROONDAS DE ELECTROCATALIZADORES PARA CELDAS DE COMBUSTIBLE

Edgar J. Borja Arco a*

^a Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Química, Departamento de Física y Química Teórica.

*Autor de correspondencia: eborja@unam.mx

Palabras Claves: Celdas de combustible; electrocatalizadores; síntesis de materiales.

Las celdas de combustible son dispositivos electroquímicos que transforman la energía química de un combustible (H₂) en energía eléctrica de manera directa a través de reacciones electroquímicas: reacción de reducción de oxígeno y reacción de oxidación de hidrógeno. estas reacciones son favorecidas por unos materiales llamados electrocatalizadores, los cuales en su mayoría son sintetizados mediante métodos convencionales de calentamiento, por ejemplo: síntesis a reflujo y reacciones en estado sólido. sin embargo, el calentamiento no es uniforme, lo que puede dar lugar a la formación de subproductos no deseados, así como la descomposición de los reactivos precursores; además de que los tiempos de reacción son muy largos (5-24 horas), y para el caso específico de la síntesis a reflujo, es necesario el uso de disolventes orgánicos.

Por el contrario, el tratamiento térmico asistido por microondas crea nuevas posibilidades en el área de síntesis de materiales, ya que las microondas pueden transferir energía a las especies reactivas de manera directa, tal efecto es conocido como "calentamiento molecular", lo que permite la síntesis de materiales que normalmente no son posibles por un método de calentamiento convencional. la irradiación por microondas ha sido empleada recientemente en varios estudios de reacciones para la síntesis de materiales nano-porosos, con propiedades favorables en la cinética y selectividad hacia ciertas reacciones específicas. otra ventaja es el uso de h2o como disolvente o medio de reacción, por lo que se vuelve un proceso de síntesis verde.

En este trabajo se presenta la comparación de las actividades electroquímicas de materiales sintetizados por métodos convencionales y por un método asistido por microondas.



"BIOSENSORES Y EMPRENDEDORISMO TECNOLÓGICO UNIVERSITARIO: MÁS ALLÁ DEL ACADEMICISMO MONODISCIPLINAR Y LA EVALUACIÓN ENTRE PARES"

Fausto N. Comba ^a, Lucio E. Simonella ^b y Baruzzi Ana María ^b.

- ^a Centro de Investigación y Transferencia de Villa María, CONICET. Departamento de Ingeniería Química, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Villa María, Córdoba, Argentina.
- ^b Instituto Nacional de Investigaciones en Físico Química de Córdoba, CONICET. Departamento de Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina.

* Autor de correspondencia: biogcomba@gmail.com.ar

Novosens es un emprendimiento universitario de base tecnológica que desarrolla soluciones a medida para la medición de compuestos de interés para la agroindustria. El emprendimiento ha egresado de la Incubadora de Empresas de la Universidad Nacional de Córdoba, Argentina. Basa sus desarrollos en la utilización de biosensores electroquímicos, esta biotecnología permite la medición selectiva de compuestos de manera rápida y económica en relación a muchas de las alternativas analíticas utilizadas. Actualmente se encuentra validando su tecnología en bodegas vitivinícolas, biorrefinerías etanoleras y con productores artesanales de cerveza. Estos equipos prototipos permiten la cuantificación exacta y directa de alcohol etílico en matrices como mostos, vinos y sopas fermentativas provenientes de la molienda de maíz. Por otro lado, el emprendimiento posee en su cartera de productos, biosensores para la cuantificación de glucosa, ácido láctico, lactosa, ácido oxálico entre los más importantes, que resultan de interés para otros mercados como el sanitario, la industria láctea y golosinera así como también en el deporte de alto rendimiento.

Gestar una empresa de base tecnológica desde la academia sin dudas exige no sólo salir de los laboratorios sino también cambiar cierta mentalidad mono-discliplinar. La construcción de prototipos funcionales, útiles, robustos y escalables industrialmente implica un abordaje multidisciplinario focalizado en la generación de conocimiento útil para su posterior aplicación concreta. Cabe destacar que este conocimiento gestado, no necesariamente es de frontera. Los desarrollos de Novosens son el producto de la confluencia de disciplinas como la química (electro)analítica, biotecnología aplicada, nanotecnología, ingeniaría electrónica y electromecánica, diseño industrial, propiedad intelectual y la articulación con oficios como la tornería, herrería y matricería industrial. Además de esta conjunción sinérgica de conocimientos académicos, están las experiencias y/o trayectorias propias del equipo emprendedor y de sus colaboradores científicos. Se suma a todo esto ciertos saberes no enciclopédicos (no figuran en ningún paper) como así también el conocimiento tácito y experiencia práctica aportados por técnicos de laboratorio, ingenieros de proceso, enólogos y productores vitivinícolas.

El estudio y desarrollo de biosensores desde una perspectiva tecnológica es un área de investigación y desarrollo vacante en nuestra Latinoamérica. La misma presenta una importante potencialidad para la transferencia hacia el sector soscioproductivo de bienes y servicios de alto valor agregado, sustitución de importaciones y generación de empleo calificado y bien remunerado. Es importante mencionar también el rol protagónico que cumple el Estado en este tipo de proyectos de riesgo al apostar al desarrollo de tecnologías autóctonas y soberanas traccionadas desde el sistema socioproductivo local. Tal como ocurre en países desarrollados tecnológicamente, de forma sostenida el Estado ha sido partícipe activo en el desarrollo científico-tecnológico con foco en la generación de una matriz productiva cada vez más diversificada y tecnificada a partir de la incorporación de conocimiento intensivo.

UPCONVERSION: ODYSSEY

John A. Capobianco a*.

^a Department of Chemistry and Biochemistry, Centre for NanoScience Research Concordia University, Montreal,
Canada

* Corresponding author: John.Capobianco@Concordia.ca

Keywords: Upconversion; nanomedicine; drug delivery; nanothermometry, PDT.

The field of upconversion in ion doped system can be traced back to an idea of Bloembergen in 1959. Bloembergen proposed that IR photons could be detected and counted through sequential absorption(ESA) within the levels of a given ion in a solid. Prior to the 1960s, all anti Stokes emissions, which were known to exist, involved emission energies in excess of excitation energies by only a few kT. Thus they were linked to thermal population of energy states above excitation states by such an energy amount. Role of energy transfer in upconversion was recognized by Auzel in 1966. The period 1970-1990 was rich in the research of upconversion in single crystals, glasses and glass ceramics. The driving force was the search for new laser materials using upconversion. We witnessed the synthesis of many of the bulk materials such as LiYF₄, CaF₂, NaYF₄, NaGdF₄, YF₃, LaF₃, LiSrAlF₆, LiCaAlF₆, LiSrGaF₆, LiLuF₄, BaY₂F₈, BaLuF₈, for potential applications as laser host materials. This area of research continued to flourish, however there was a change appearing on the horizon with the development of nanomaterials. From late 1990s to early 2000 we witnessed an interest in studying upconversion in nanomaterials. Initially, oxides were synthesized and many studies were performed on their upconversion properties. Y₂O₃ was one of the material studied initially and in time gadolinium gallium garnet, YVO, etc. were included to the list. The mid 2000 to today has witnessed an exponential growth in publications on fluoride based nanoparticles due to their efficient upconversion but principally for their potential applications in nanobiomedicine (bioimaging, drug delivery, nanothermometry, photodynamic therapy and multifunctional platforms).



DESARROLLO TECNOLÓGICO EN EL ÁREA DE MATERIALES

Lorena Magallón Cacho a, b*.

^a Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT), México.

^b Instituto Nacional de Electricidad y Energías Limpias (INEEL), México.

*Autor de correspondencia: lorena.magallon@conacyt.mx; lorena.magallon@ineel.mx

Palabras Claves: Celdas de combustible; materiales cerámicos policristalinos; varistores.

En la actualidad, uno de los grandes retos del quehacer científico es trasladar los conocimientos de la ciencia básica al desarrollo tecnológico; sin embargo, aún existe una brecha considerable entre ambos sectores. La mayoría de los investigadores realizan publicaciones en revistas científicas especializadas con el propósito de llevar a cabo la correspondiente divulgación de sus resultados, pero en la mayoría de los casos sin realizar la debida protección de información sensible. El área de los materiales tiene un amplio potencial de aplicación hacia el desarrollo de nuevas tecnologías y que pueden resultar de gran importancia para el sector industrial. Una de estas áreas es el sector energético, tal es el caso de materiales cerámicos policristalinos aplicados en la fabricación de varistores o en el desarrollo de materiales para para potencializar la implementación tecnológica de celdas de combustible. En esta plática se presentarán los resultados de diferentes proyectos que van desde la concepción como tema de interés, el desarrollo experimental y potencial implementación como desarrollo tecnológico.

SISTEMAS ORGANIZADOS "INTELIGENTES" Y SU APLICACIÓN EN NANOCIENCIA

N. Mariano Correa a, b*

^a Departamento de Química. UNRC. Agencia postal # ³. (X⁵⁸⁰⁴ALH) Rio Cuarto, Córdoba). ^b Instituto para el Desarrollo Agroindustrial y de la Salud (IDAS), CONICET – UNRC. Agencia Postal # ³, C.P. X⁵⁸⁰⁴BYA,

Río Cuarto, Argentina * Autor de correspondencia: mcorrea@exa.unrc.edu.ar

Palabras Claves: Sistemas Organizados; vesículas; micelas inversas; nanomedicina; insulina.

Las soluciones designadas como *soluciones organizadas o autoensambladas* son un campo importante y promisorio en el progreso de varias ramas de la ciencia moderna y la tecnología: industria de los colorantes, detergentes y cosméticos, extracción líquido-líquido, electrosíntesis orgánica, catálisis, polimerización, almacenamiento de energía fotoquímica, formulación y encapsulado de medicamentos, biodegradación, hidrólisis enzimática, sustitutos de la sangre, simulación de membranas biológicas y química analítica. Dentro de este tipo de soluciones se pueden encontrar a las micelas inversas y las vesículas o liposomas. La investigación en este tipo de sistemas es atractiva ya que, son sistemas importantes para la industria y producen una organización molecular similar a los huecos acuosos de los bioagregados (biomembranas, mitocondrias, etc.). Además, hay una analogía entre el corazón polar de estas micelas con los sitios activos de las enzimas. Por lo tanto, estos sistemas son de gran actualidad dentro de la *nanobiotecnología* y ofrecen un medio peculiar de reacción, un tipo de *nanoreactor* que muestra en muchos casos importantes efectos catalíticos.

Estos *sistemas autoensamblados* presentan una interfaz que ofrecen un medio peculiar y único para que ocurran diferentes procesos. Es por este motivo, que es de fundamental importancia conocer las propiedades fisicoquímicas que otorgan a dicha interfaz sus diferentes funcionalidades. Desde hace ya varios años nuestro grupo de trabajo se encuentra abocado al desarrollo de métodos que optimicen la detección de interacciones moleculares entre diferentes moléculas pruebas y los distintos medios donde se encuentren. De esta manera pretendemos comprender los factores que determinan la solubilización o ubicación en diferentes sitios en los distintos medios, determinando así cuan *"inteligente"* es cada medio organizado para reconocer un soluto.

En esta oportunidad, se expondrán algunos resultados mostrando como cada sistema ofrece una potencial aplicación diferente y las distintas líneas de investigación que se han generado en torno a estos fascinantes sistemas supramoleculares.



SÍNTESIS HÚMEDA DE ÓXIDO DE ZINC: CONTROLANDO SU MORFOLOGÍA Y EMISIÓN DE LUZ

Oscar Marín a, b*, Vanessa González a, b, Mónica Tirado a, c y David Comedi a, b.

^a Instituto de Física del Noroeste Argentina (INFINOA) – Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) – Universidad Nacional de Tucumán (UNT), Avenida Independecia ¹⁸⁰⁰, San Miguel de Tucumán, CP ⁴⁰⁰⁰, Tucumán, Argentina

^b Nanoproject – LAFISO – Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología (FACET), UNT, San Miguel de Tucumán, Tucumán, Argentina

c NANOPROJECT – LNPD – Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología (FACET), UNT, San Miguel de Tucumán, Tucumán, Argentina

* Autor de correspondencia: omarin@herrera.unt.edu.ar

Palabras Claves: Síntesis solvotermal; ZnO nanoestructurado; morfología; fotoluminiscencia.

El ZnO es un óxido semiconductor de banda ancha con una energía de banda prohibida de 3.37 eV y 60 meV de energía de ligadura excitónica, características que le confieren luminiscencia ultravioleta a temperatura ambiente entre otras propiedades interesantes para aplicaciones tecnológicas. Esto, sumado a su alta disponibilidad, bajo impacto ambiental y la facilidad relativa para su síntesis, lo convierten en una gran promesa tecnológica. Aunque son muchas las características que determinan el comportamiento del ZnO y sus posibles aplicaciones, la morfología tiene un alto impacto. Por ejemplo, para el desarrollo de nanoláseres o guías de ondas, es conveniente utilizar nanohilos con alta cristalinidad para construir cavidades luminosas resonantes nanométricas, con mínimas pérdidas por dispersión; así mismo, en nanopartículas de ZnO, un control del tamaño y forma deriva en un control fino de las propiedades electrónicas, impactando en la capacidad para transportar carga eléctrica o interactuar con la luz. En consecuencia, diversos grupos de investigación a nivel mundial buscan nuevas metodologías de síntesis que permitan controlar eficientemente la forma y el tamaño de este material. En este trabajo se presentan y discuten resultados en cuanto al control de la morfología y la emisión de luz de nano y microestructuras de ZnO fabricadas por síntesis solvotermal. Se demuestra como los parámetros de síntesis, especialmente el solvente, el agente alcalino o mineralizante y la sal metálica precursora, impactan drásticamente sobre dichas propiedades, pasando de la obtención de arreglos ordenados de nanohilos sobre un sustrato a películas delgadas microporosas cambiando únicamente el solvente o de nanopartículas compactas a microesferas huecas cambiando el agente alcalino.

LAS TÉCNICAS ELECTROQUÍMICAS COMO ALTERNATIVA PARA LA CARACTERIZACIÓN DE SISTEMAS SUPRAMOLECULARES

Patricia G. Molina a, b*.

^a Instituto para el Desarrollo Agroindustrial y de la Salud (IDAS), UNRC-CONICET, Argentina
^b Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas Fisicoquímicas y Naturales, Universidad Nacional de Río

Cuarto, Río Cuarto, Argentina

* Autor de correspondencia: pmolina@exa.unrc.edu.ar

Palabras Claves: Vesículas; nanopartículas lipídicas; voltamperometría de onda cuadrada; transporte de fármacos.

Las técnicas electroquímicas presentan numerosas ventajas respecto a las técnicas convencionales utilizadas en el estudio de Sistemas Supramoleculares. Son rápidas, selectivas, sensibles y el
equipamiento es más económico respecto a otras técnicas comúnmente utilizadas. Debido a que las
soluciones de estos sistemas por lo general son turbias (tamaños superiores a los 100 nm) presentan
la ventaja que dicha turbidez no afecta a su determinación electroquímica problema comúnmente encontrado en las técnicas espectroscópicas. Además, las técnicas electroquímicas permiten el estudio
de estos sistemas abarcando desde estudios analíticos, caracterización fisicoquímica hasta estudios
de liberación de fármacos y utilizan muy pequeño volumen constituyendo una ventaja sobre las técnicas cromatográficas que requieren grandes volúmenes de solvente. En este trabajo se presentarán
resultados obtenidos para Vesículas Unilaminares Grandes constituidas por diferentes surfactantes,
y Nanopartículas Lipídicas utilizando Voltamperometría de Onda Cuadrada una de las técnicas de
pulso más sensible y rápida. Estos estudios permiten corroborar que estas técnicas son una excelente
alternativa a las empleadas para la caracterización de este tipo de sistemas.



CYCLOMETALATED COMPLEXES: FROM CATALYSIS TO ANTICANCER THERAPY

Ronan Le Lagadec a*

^a Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, ⁰⁴⁵¹⁰ CD México, México * Corresponding author: ronan@unam.mx

Keywords: Group 8 metals; cyclometalated compounds; living polymerization; cytotoxic activity.

Our research team has been studying the synthesis and properties of cyclometalated complexes from group 8 metals (Fe, Ru, Os). In particular, we have prepared series of compounds of the general formula $[M(C\sim N)(N\sim N)(NCMe)_2]^+$ and $[M(C\sim N)(N\sim N)_2]^+$ $(N\sim N=2,2'-bipyridine\ y\ 1,10-phe$ nanthroline; HC~N = 2-phenylpyridine). When compared to analogous coordination derivatives bearing only metal- nitrogen bonds, we found that that the substitution of one M-N bond by a σ M-C bond increases the stability and rigidity of the complexes and lowers drastically the redox potentials. Such compounds displayed a high catalytic activity in the living radical polymerization of vinyl monomers. Irradiation by visible light allowed the synthesis of series of polymers and copolymers under mild conditions (room temperature). The catalytic polymerization of recalcitrant monomers such as vinyl acetate was achieved using microwave irradiation. On the other hand, the cytotoxic properties of our cyclometalated complexes have been studied on series of human cancer cells, most of them displaying very low IC₅₀ values.² However, the mechanisms of action, in particular the determination of the biological targets and the physicochemical properties of the compounds responsible for such high activity, remain under extensive investigation. Interactions with DNA and oxidoreductases, as well as the role on the cell death of the endoplasmic reticulum stress and the generation of reactive oxygen species, have been demonstrated.³ The study of such multitarget strategy would allow to generate new molecules, more selective towards cancel cells, and consequently, preventing resistance phenomena frequently observed with platinum-based drugs.

- [1]. N. Vargas Alfredo, N. Espinosa Jalapa, A. D. Ryabov, R. Le Lagadec, L. Alexandrova, *Macromolecules*, **2012**, *45*, 8135; J. Olvera Mancilla, S. López Morales, J. Palacios Alquisira, D. Morales Morales, R. Le Lagadec, L. Alexandrova, *Polymer*, **2014**, 55, 1656.
- [2]. L. Leyva, C. Sirlin, L. Rubio, C. Franco, R. Le Lagadec, P. Bischoff, C. Gaiddon, J. P. Loeffler, M. Pfeffer, *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2007, 3055; B. Boff, C. Gaiddon, M. Pfeffer, *Inorg. Chem.* 2013, 52, 2705.
- [3]. H. Rico Bautista, R. O. Saavedra Díaz, L. Q. Shen, C. Orvain, C. Gaiddon, R. Le Lagadec, A. D. Ryabov, *J. Inorg. Biochem.*, **2016**, *163*, 28; V. Vidimar, C. Licona, R. Cerón Camacho, E. Guerin, P. Coliat, A. Venkatasamy, M. Ali, D. Guenot, R. Le Lagadec, A.C. Jung, J. N. Freund, M. Pfeffer, G. Mellitzer, G. Sava, C. Gaiddon, *Cancer Lett.*, **2019**, *440-441*, 145.

DISEÑO Y CARACTERIZACIÓN DE SISTEMAS ORGANIZADOS ORIENTADOS A LA QUÍMICA SOSTENIBLE Y A LA NANOBIOTECNOLOGÍA

R. Darío Falcone a, b*

^a Departamento de Química. Universidad Nacional de Río Cuarto (UNRC). Río Cuarto, Argentina. ^b Instituto para el Desarrollo Agroindustrial y de la Salud (IDAS). CONICET - UNRC. Río Cuarto, Argentina. * Autor de correspondencia: rfalcone@exa.unrc.edu.ar

Palabras Claves: Líquidos iónicos; micelas inversas; vesículas; surfactantes.

La investigación de sistemas supramoleculares autoensamblados de escala nanométrica (sistemas organizados) ha ganado cada vez más atención debido a su gran potencial en aplicaciones relacionadas con la nanotecnología. Cuando se disuelven moléculas anfifilicas (surfactantes) en distintos medios, éstas forman diferentes sistemas supramoleculares, dentro de los que se destacan las vesículas y micelas inversas. El tipo de sistema formado dependerá, entre otras variables, de la estructura del surfactante y del tipo de solvente utilizado. Así, las micelas inversas se esquematizan como una monocapa de surfactantes que rodea un solvente polar, formando gotas uniformemente distribuidas en una fase orgánica no polar. Las vesículas son estructuras supramoleculares esféricas formadas por bicapas autoensambladas de surfactantes en solución acuosa.

Los líquidos iónicos (LIs) son una familia de compuestos que ha revolucionado la Química en las últimas décadas y por ello se han utilizado en diferentes transformaciones inorgánicas, orgánicas, y organometálicas. Estos compuestos, son sales líquidas con relativamente bajos puntos de fusión (< 100 °C). Dentro de los más utilizados, se destacan los LIs formados por cationes de 1-alquil-3-metilimidazolio y aniones típicamente inorgánicos en naturaleza. Dadas las propiedades tan versátiles que presentan los LIs como solventes, es de interés investigar su encapsulamiento en micelas inversas, ya que es sabido que los solventes cambian dramáticamente su estructura "bulk" cuando son incorporados en el interior polar micelar. Por otro lado, un área todavía poco explorada es la de utilizar LIs con propiedades anfifilicas para generar diferentes sistemas organizados.

Teniendo en cuenta todos estos antecedentes, en esta presentación se discutirá como el encapsulamiento de diferentes LIs a escala nanométrica cambia drásticamente las propiedades de los mismos, afectando además la interfaz de los sistemas organizados formados. Además, se expondrán algunos resultados utilizando LIs tanto como surfactantes como en reemplazo de solventes orgánicos no polares, mostrando como cada sistema ofrece una potencial aplicación diferente. Finalmente, se mostrarán resultados del uso de solventes no polares amigables al ambiente en la formación de micelas inversas con posibles aplicaciones en el transporte de fármacos y al desarrollo de formulaciones tópicas. En este sentido y aprovechando la biocompatibilidad de sus componentes se comentará sobre las distintas líneas de investigación que se han generado en torno a estos fascinantes sistemas supramoleculares.







LUMINISCENCIA PERSISTENTE EN APLICACIONES BIOMÉDICAS: DESARROLLO DE NANOFÓSFOROS DE CAS:EU^{2+/}DY³⁺

Diana Consuelo Rodríguez Burbano a*.

^a Escuela de Medicina y Ciencias de la Salud, Programa de Ing. Biomédica, Universidad del Rosario. Bogotá D.C – Colombia.

* Autor de correspondencia: dianaco.rodriguez@urosario.edu.co

Palabras clave: Luminiscencia; nanopartículas de CaS nanofósforos; autofluorescencia.

Nanofósforos que exhiben luminiscencia persistente son materiales de tamaño nanométrico que han llamado la atención de la comunidad científica para ser usados como sondas luminiscentes en la adquisición de imágenes fluorescentes. Sin embargo, el número de materiales que ofrecen luminiscencia persistente con longitudes de onda favorables para el desarrollo de sondas luminiscentes para aplicaciones biomédocas es muy limitado. Por esta razón se investigó la síntesis y caracterización de nanoparticulas de CaS dopadas con Eu^{2+} y Dy^{3+} . Estos nanofósforos son capaces de almacenar energía debido a la presencia de defectos que actúan como trampas de electrones. Esto proporciona un nuevo enfoque para evitar la exposición del tejido biológico a la irradiación de alta energía y eliminar la generación de autofluorescencia ya que estos nanofósforos se cargan *ex vivo* con radiación UV. Una vez inyectadas en el cuerpo, se pueden adquirir imágenes *in vivo* mediante la detección de la luminiscencia persistente (λ_{ems} = 650 nm) que se origina en las trampas poco profundas presentes en el nanofósforo. Una vez que la luminiscencia persistente ha cesado, la energía almacenada en trampas más profundas se puede liberar con irradiación de luz infrarroja cercana (NIR), lo que resulta en una emisión roja fotoestimulada.



INGENIERÍA DE SUPERFICIES DE ELECTRODO MODIFICADAS ME-DIANTE MATERIALES POLIMÉRICOS RESPONSIVOS Y NANOPAR-TÍCULAS METÁLICAS

Eduart Gutiérrez a*.

a Grupo de Investigación en Fisicoquímica Teórica y Experimental (GIFTEX)

Universidad Industrial de Santander, Colombia.

* Autor de correspondencia: eduaragp@gmail.com

La modificación superficial de electrodos convencionales (Au, Pt, Carbón vitreo, ..., etc.) con el objeto de mejorar sus propiedades, ha sido tema de profunda investigación en los últimos años. El interés en el desarrollo de electrodos modificados se basa en sus posteriores aplicaciones en diversos campos entre ellos los sensores, el almacenamiento y conversión de energía, la liberación controlada de medicamentos, la protección contra la corrosión, superficies hidrófobas, entre otras. Actualmente, el progreso en la ciencia e ingeniería de materiales, han hecho posible que se disponga de una amplia variedad de materiales, aptos para la modificación de superficies (polímeros conductores, nanopartículas metálicas, cepillos poliméricos, materiales carbonosos, membranas lipídicas, hidrogeles electroconductores).

Recientemente, un gran interés en el desarrollo de electrodos híbridos o compósitos basados en diversas combinaciones de materiales nano y micro-estructurados, con fines electro-analíticos mejorando la sensibilidad y selectividad en la detección de diversos analitos han sido desarrollados.

Los electrodos compósitos ofrecen potenciales ventajas en comparación con los electrodos tradicionales, consistentes en una fase conductora simple. Por ejemplo, los electrodos compósitos pueden a menudo fabricarse con gran flexibilidad a cuanto, al tamaño y forma del material, permitiendo una fácil adaptación a una gran variedad de configuraciones electródicas. Esta investigación presenta el diseño y desarrollo racional de electrodos compósito basados en polímeros conductores y arreglo de nanopartículas metálicas, hidrogeles electroconductores, cepillos poliméricos y membranas lipídicas, además su posterior evaluación en sistemas de detección, liberación electroestimulada de fármacos y superficies barrera con control de la permeabilidad respectivamente.

"GÉNERO RENEALMIA: NUEVAS ESPECIES POR INVESTIGAR EN EL DEPARTAMENTO DEL QUINDÍO"

Eunice Ríos Vásquez a*.

^a Grupo Químico de Investigación y Desarrollo Ambiental- QIDEA-, Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías, Programa de Química. Universidad del Quindío, Colombia.

* Autor de correspondencia: erios@uniquindio.edu.co

Palabras Claves: Zingiberaceae; Renealmia; fenilpropanoides; diarilheptanoides; aceites esenciales.

La familia Zingiberaceae, es la más grande del orden Zingiberales; distribuida principalmente en México, Perú, Brasil, Guayana, Surinam, Venezuela y Colombia. Las especies que comprenden esta familia se caracterizan a nivel químico por la biosíntesis de flavonoides, fenilpropanoides y curcuminas, todos compuestos fuertemente aromáticos, consecuentemente al cortar una parte de estas plantas o macerar sus hojas, los tejidos expiden un olor característico. Los aceites esenciales (AE's) también se han obtenido desde sus rizomas. Tienen importancia económica, como la raíz de jengibre (*Zingiber officinale*) y de la *Cúrcuma longa* (cúrcuma) usadas como saborizantes de vinos, cervezas, refrescos y alimentos. Algunas de las especies de ésta familia se han utilizado en la medicina tradicional para tratar inflamación, esguinces, reumatismo, dolor muscular, como también contra mordeduras de serpientes y para tratar efectos secundarios de leishmaniasis.

Renealmia es el único género de ésta familia presente en América tropical. Posee cerca de 75 especies, de las cuales se conoce que 50 se encuentran en América y 25 en África tropical. Aún con la amplia distribución e importancia etnobotánica de varias especies de éste género, existen un número limitado de estudios fitoquímicos, taxonómicos y biológicos. En el departamento del Quindío se han identificado 5 especies *R. cernua*, *R. ligulata*, *R. occidentalis*, *R. thyrsoidea* y *R. foliifera*, las cuales se han comenzado a estudiar en el grupo de investigación QIDEA.

Las investigaciones están encaminadas a la contribución del estudio fitoquimico y biológico de éstas especies. Se investiga a la fecha a *R. cernua*, *R. ligulata*, *R. thyrsoidea* y *R. foliifera*. Usando hidrodestilacion e hidrodestilacion acoplado a Clevenger y asistido por microondas se han obtenido los AE's, y a partir del extracto total polar se han obtenido algunos metabolitos secundarios. Adicional, se han evaluado algunas actividades biológicas como posibles agentes antibacteriales, antioxidantes, antifúngicos y antiofídicos, principalmente.



NANO-BIOENGINEERED TOOLS FOR DISEASES DIAGNOSTIC AND THERAPEUTIC

Jahir Orozco a*.

^a Max Planck Tandem Group in Nanobioengineering, Universidad de Antioquia.

Complejo Ruta N, Calle ⁶⁷, N° ⁵²-²⁰, Medellín, ⁰⁵⁰⁰¹⁰, Colombia.

* Corresponding author: grupotandem.nanobioe@udea.edu.co

Keywords: Nanobioengineering; nanobiosensors; nano(micro)carriers; diagnosis; treatment.

Health care has experienced a paradigm shift towards personalized medicine. Whereas significant advances have been made in this direction, its full potential still requires deeper exploration. Biomarker discovery, diseases diagnosis and treatment benefit from emerging technologies. The growing field of combining diagnosis with treatment (theranostics), which is paving the way towards personalized medicine, will greatly benefit from nano-bioengineering technology. In this context, new nanobiotechnology-enabled medical devices aim to provide not only convenient real-time diagnosis of diseases, closer to the patient, but also opportunities for a more efficient drug delivery and targeted therapeutic, with respect to conventional technologies. Diagnostic tests and devices based on biosensors are being increasingly exploited as valuable alternatives to standard laboratory instrumentation for clinical diagnosis, allowing simple, inexpensive and point-of-care testing systems. Functional nanobiomaterial-based assemblies have been used for efficient encapsulation of active principles and their space-temporal controlled delivery.

This talk is aimed to discuss novel hybrid nano-bioengineered materials-based functional platforms that have been developed in our group for diagnosis and treatment of diseases. In the first part it will highlight innovative approaches regarding: i) Biosensors for the specific and highly sensitive pathogen detection, in a simple format, ii) Novel superior, hybrid nano(bio)platforms for the development of electrochemical (bio)sensors of improved performance; and iii) Differential nanogenosensors for diagnosis of Zika virus and its discrimination among related viruses such as dengue and chikungunya. In the second part, the talk will cover aspects related to: iv) New strategies for encapsulation of therapeutic agents into functionalized nanoparticles to fight intracellular infections; and v) Functionalized photosensitive polymeric nanocarriers for specific delivery of cargo in cardiomyocytes. Overall, the talk will demonstrate the enormous potential of nanobiomaterials for tackling real problems in today's world, highlighting their opportunities for multiple applications in clinical diagnostic and therapy, towards a new generation of devices with enhanced properties to inaugurate decentralized and inter-clinical epidemiological surveillance systems.

MÁS ALLÁ DE LAS BATERÍAS: UNA ALTERNATIVA DE ALIMENTA-CIÓN DE *WEARABLE DEVICES* A TRAVÉS DE LA RECUPERACIÓN DE CALOR

Jaime Andrés Pérez Taborda a*

a Departamento de Ingeniería Eléctrica y Electrónica, Universidad de los Andes, Colombia.

* Autor de correspondencia: jaimeandres@ingenieros.com; ja.perezt@uniandes.edu.co

La recuperación de energía a través de gradientes térmicos ha atraído la atención como una opción tecnológica capaz de reemplazar o complementar el uso de las baterías. Esto es principalmente importante en el actual escenario donde miles de millones de dispositivos electrónicos móviles de bajo consumo (Wearable Devices) son utilizados y dependen en su mayoría de baterías en ambientes donde el suministro eléctrico estable no es posible. En lo que se refiere a los materiales termoeléctricos (TE), estos son ampliamente conocidos por su capacidad de convertir la energía térmica en energía eléctrica y viceversa. La eficiencia termoeléctrica está relacionada con la figura de mérito zT la cual correlaciona la dependencia entre el coeficiente Seebeck, la conductividad eléctrica y la conductividad térmica. Una de las principales rutas abordadas en el incremento de esta eficiencia TE es precisamente la reducción en la conductividad térmica sin disminuir el coeficiente Sebeeck o la conductividad eléctrica [1-3]. En este sentido, presentamos un novedoso proceso de fabricación de nanoestructuras de seleniuros con aplicaciones TE en temperaturas cercanas al ambiente. En esta charla presentamos avances record en la obtención de nanoestructuras en forma de película delgada de seleniuro de cobre (Cu_{2x}Se) [4] y de seleniuro de plata (Ag_{2x}Se) [5] con alta eficiencia termoeléctrica a temperaturas cercanas a la ambiental [6]. Esta técnica permite un fino control de la estequiometria, orientación cristalográfica y eficiencia termoeléctrica a bajas temperaturas de sustrato siendo compatible con la fabricación de películas delgadas sobre sustratos orgánicos y/o flexibles.

- [1]. J. A Pérez-Taborda *et.al*, Silicon-Germanium (SiGe) Nanostructures for Thermoelectric Devices: Recent Advances and New Approaches to High Thermoelectric Efficiency, In book, Publisher: InTechOpen, 2017
- [2]. J. A Pérez-Taborda *et.al*, Ultra-low thermal conductivities in large-area Si-Ge nanomeshes for thermoelectric applications in Scientific Reports 6:32778, 2016
- [3]. J. A Pérez-Taborda *et.al*, Low thermal conductivity and improved thermoelectric performance of nanocrystalline silicon germanium films by sputtering in Nanotechnology 27(17):175401, 2016
- [4]. J. A Pérez-Taborda *et.al*, Pulsed Hybrid Reactive Magnetron Sputtering for High zT Cu2Se Thermoelectric Films, Advanced Materials Technologies, 201700012, 2017
- [5]. J. A. Perez-Taborda, O. Caballero-Calero, L. Vera-Londoño, F. Briones, M. Martin-González, Adv. Energy Mater. 2017, 1702024. https://doi.org/10.1002/aenm.201702024
- [6]. Vera, L., Caballero-Calero, O., Pérez-Taborda, J. A., & Martín-González, M. (2018). Advances in Scanning Thermal Microscopy Measurements for Thin Films. In Coatings and Thin-Film Technologies. IntechOpen.



NANOENCAPSULACIÓN DE PÉPTIDOS BIOACTIVOS Y SU ACTIVIDAD FRENTE A BACTERIAS PATÓGENAS

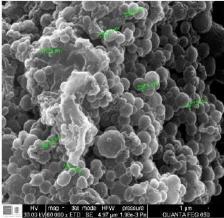
Jenniffer Cruz a*, Claudia C. Ortiz b, Fanny Guzmán c, Nohora Juliana Rueda a y Rodrigo G. Torres d

^aUniversidad de Santander, Facultad de Ciencias de la Salud, Instituto Masira, Grupo de Investigación Biología Molecular y Biotecnología - BIOMOL, Bucaramanga, Colombia.

^b Escuela de Microbiología y Bioanálisis, Grupo de Investigación en Bioquímica y Microbiología (GIBIM), Universidad Industrial de Santander, Edificio Camilo Torres ²⁰², Bucaramanga, Colombia.

^c NBC Núcleo Biotecnología Curauma, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Campus Curauma, Av. Universidad, ³³⁰ Valparaíso, Chile.

d Instituto Colombiano de petróleo ICP, Km ⁷ autopista a Piedecuesta Santander, Colombia * Autor de correspondencia: sintesis quimica@udes.edu.co



lograr la entrega dirigida de péptidos y proteínas con fines terapéuticos. Diversidad de nanovehículos para la entrega de péptidos, proteínas y genes han sido desarrollados debido a su capacidad para proteger estas moléculas de la degradación en el tracto gastrointestinal y en el torrente sanguíneo. Particularmente los péptidos, los cuales han surgido como una alternativa muy interesante para ser usados como compuestos antimicrobianos, son muy susceptibles a este tipo de degradación enzimática o en presencia de un pH extremo. En consecuencia, se ha propuesto el uso de diferentes nanovehículos como agentes protectores, que facilitan la liberación controlada del fármaco disminuyendo la citotoxicidad del mismo [1].

Los nanovehículos son una de las herramientas más útiles para

Fig.1. PLGA-GIBIM-P5S9K nanoparticles

En este trabajo de investigación se diseñaron, sintetizaron y caracterizaron 18 nuevos péptidos con un amplio espectro de propiedades antibacterianas, utilizando la estrategia F-moc en bolsas de té. Los péptidos antimicrobianos (PAMs) se caracterizaron mediante espectrometría de masas Maldi-TOF y espectroscopía de dicroísmo circular (DC). Posteriormente, se determinó la actividad antibacteriana *in vitro*, frente cepas patógenas de *Escherichia coli* O157: H7 (*E. coli* O157: H7), *Pseudomonas aeruginosa* (*P. aeruginosa*) y *Staphylococcus aureus* resistente a la meticilina (SARM), utilizando el método de microdilución. Se demostró actividad bactericida para todos los PAMs frente al menos una de las cepas patógenas ensayadas. Los PAMs denominados GIBIM-P5S9K y GIBIM-P5F8W presentaron las mejores actividades antibacterianas, alcanzando una Concentración Mínima Inhibitoria (CMI₀₀) en rangos de 0.5 a 25 μM, frente a las tres cepas.

Posteriormente, el PAM GIBIM-P5S9K se encapsuló en nanopartículas (NPs) poliméricas de PLA y PLGA utilizando el método de doble emulsión difusión de solvente. Además, las NPs se caracterizaron mediante Microscopía Electrónica de Barrido (SEM), Dispersión de luz en Modo Dinámico (DLS), Potencial Zeta y Espectroscopía Infrarroja por Transformada de Fourier (FT-IR). Las NPs mostraron forma esférica y tamaño promedio comprendido entre 160 y 330 nm (Fig.1). Por otra parte, se evaluó el efecto antibacteriano de las NPs cargadas con GIBIM-P5S9K, mediante la determinación de la CMI₉₉; se determinó un valor de 75 y 25 μM frente a SARM y *P. aeruginosa*, respectivamente. La encapsulación en el biopolímero no potenció la actividad antibacteriana, pero disminuyó el efecto citotóxico cinco veces menos y aumentó la estabilidad del péptido contra la acción de proteasas cuando se expuso en presencia de suero humano. Finalmente, la actividad antibacteriana exhibida por los péptidos libres y encapsulados contra las cepas patógenas, nos permiten considerar las NPs como una alternativa nueva y potencial para el desarrollo de nuevos agentes antimicrobianos

[1]. Danhier, F., Ansorena, E., Silva, J. M., Coco, R., Le Breton, A., & Préat, V. Journal of Controlled Release 161, 2(2012) 505-22.

GRAPHENE OXIDE MULTILAYERS FROM BAMBOO: SYNTHESIS, PROPERTIES AND POTENTIAL APPLICATIONS IN ELECTRONICS

Jhon Jairo Prías Barragán a, b*, Katherine Gross b, Hernando Ariza Calderón a, Pedro Prieto Pulido b.

^b Center of Excellence on Novel Materials and Department of Physics at Universidad del Valle,

P. O. Box ²⁵¹⁵⁷, Cali, Colombia.

* Autor de correspondencia: jjprias@uniquindio.edu.co

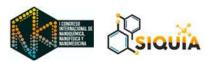
Preparation of graphene via oxidization and subsequent exfoliation of graphite is one of the most common techniques. However, this technique has the disadvantages of being time consuming and environmentally toxic for large-scale production. Therefore, in this work we proposed and employed a new, simple, cost-effective pyrolytic method to synthetize graphene oxide multilayers samples (GO) by using the bamboo (Guadua angustifolia Kunth) pyroligneous acid (BPA) as material source [1-5]. The GO-BPA samples were synthesized by using the double thermal decomposition (DTD)-method under controlled nitrogen atmosphere in an automated pyrolysis system for different carbonization temperatures varying from 673 to 973 K. The morphological, structural, compositional, vibrational, electrical and magnetic properties were studied and it was found that GO-BPA samples exhibit nanoplatelets morphology with thicknesses varying from 25 to 100 nm and lateral size varying from 5 to 100 μm, polycrystalline structure with crystal size varying from 1.3 to 1.9 nm, vibrational characteristics of thermal isolator material with conduction mainly by phonon-phonon interaction, electrical behavior as narrow band-gap semiconductor system at band-gap values varying from 0.11 to 0.30 eV with conduction mainly by carrier-impurity interaction and magnetic properties of soft material with ferromagnetism order observed at room temperature showing saturation magnetization varying from 2 x 10-3 to 40 x 10-3 emu/g induced mainly by boundary defects presence in the samples [1-3].

These results revealed a DTD-method as a new technique to obtain graphene oxide multilayers with high stability and reproducibility in its transport properties and confirm that GO-BPA samples exhibit structural, vibrational, electrical and magnetical properties similar to the reduced graphene oxide (rGO) sheets obtained via more sophisticated synthesis methods and suggest these samples in some possible applications in electronic as sensors and devices. As well as, these GO-BPA samples offer future opportunities to obtain 2D materials as graphene oxide by using an environmentally-sustainable and commercially feasible synthesis method from renewable natural resources [1-3].

Acknowledgment, this work was partially funded by the Universidad del Quindío and Universidad del Valle, also, it was realized as scientific collaborative work with Dr. Ricardo Ibarra, Dr. Raúl Arenal and Dr. Luc Lajaunie from Instituto de Nanociencia de Aragón at Universidad de Zaragoza, Spain. As well as, Dr. (C) José Darío Perea and Prof. Dr. Christoph J. Brabec from i-MEET at Friedrich Alexander Universität (FAU) of Erlangen – Nürnberg, Germany.

- [1] J. J. Prías-Barragán, K. Gross, H. Ariza-Calderón, and P. Prieto. Phys. Status Solidi A. 213 (1), 85 (2016)
- [2] K. Gross, J. J. Prías Barragán, S. Sangiao, J. M. De Teresa, L. Lajaunie, R. Arenal, H. Ariza Calderón and P Prieto. Nanotechnology. 27, 365708 (2016)
- [3] J. J. Prías-Barragán, N. A. Echeverry-Montoya and H. Ariza-Calderón. Rev. Acad. Colomb. Cienc. Ex. Fis. Nat. 39(153), 444 (2015)
- [4] N.A. Echeverry-Montoya, J. J. Prías-Barragán, L. Tirado-Mejía, C. Agudelo, G. Fonthal, and H. Ariza-Calderón. Phys. Status Solidi C. 1600258 (2017)
- [5] R. Arias-Niquepa, J. J. Prías-Barragán, M. E. Rodríguez-García. Activated Carbon Obtained from Bamboo: Synthesis, Morphological, Vibrational, and Electrical Properties and Possible Temperature Sensor. Phys. Status Solidi A. 1800422, 1-11, (2019).

^a Interdisciplinary Institute of Sciences and Electronic Instrumentation Technology Program, Universidad del Quindío, Carrera 15 Calle 12 Norte, 630001 Armenia, Colombia.



ENCAPSULAMIENTO DE FÁRMACOS EN NANOFIBRAS DE PVAL-OH, Y ESTUDIOS DE LA CINÉTICA DE LIBERACIÓN EN UN MEDIO LÍQUIDO UTILIZANDO ESPECTROSCOPIA UV-VIS

José Castillo Chamorro a*.

^a Física de Materiales Inorgánicos y Orgánicos. Programa de Física Universidad del Quindío, Armenia, Colombia.

* Autor de correspondencia: jhcastillo@uniquindio.edu.co

Palabras Claves: Fármacos, encapsulamiento, nanofibras, polímero, cinética de liberación.

Se presenta la obtención de nanofibras de poli vinil alcohol hidrolizado (PVAL-OH) y el encapsulamiento de algunos fármacos mediante la técnica de electrohilado, utilizando una aguja coaxial que permite la inyección por separado tanto de la solución polimérica como del fármaco. Se aplican diferentes potenciales entre 16 y 20 KV, una velocidad de inyección de 4 µl/h, y diferentes distancias entre aguja colector. Se presenta las curvas de control de temperatura, presión y una humedad relativa dentro de la recamara de crecimiento, que permiten en un alto porcentaje la reproducibilidad de las muestras. La morfología de las membranas poliméricas se estudia mediante microscopia electrónica de barrido (SEM). Se encuentra diámetros promedio de las fibras de 350 y 90 nm para las muestras sin y con fármaco respectivamente. La cinética de liberación del fármaco se realiza en suero oral empleando un espectrómetro 115U, con un rango entre 200 and 850 nm. Inicialmente se identifica el pico característico de absorción de cada uno de los fármacos antes de ser encapsulados y cuando son retenidos en la matriz porosa formada por las nanofibras del polímero. La respuesta de absorbancia obtenida en función del tiempo permite identificar que efectivamente los fármacos se encuentran retenidos y con la cual es posible construir curvas de la cinética de liberación en un medio líquido para cada uno de los fármacos. Por otra parte se utiliza la técnica de impedancia eléctrica compleja para evidenciar experimentalmente que los fármacos se encuentran retenidos dentro de la matriz porosa formada por las nanofibras poliméricas. Los formalismos de la permitividad, conductividad y módulo eléctrico como función de la temperatura, obtenidos a una frecuencia fija de 5 KHz, muestran anomalías térmicas por debajo de 150 K dependiendo del fármaco, asociado con la temperatura de transición vítrea, mientras que cuando son encapsulados en la red tridimensional de las nanofibras de PVAL:OH se observa que dicha transición se corre hacia temperaturas más altas.

LA IMPORTANCIA DE LOS POLINIZADORES EN LA BIODIVERSI-DAD: LA ABEJA COMO INDICADOR AMBIENTAL

Lina Marcela León Gallón a*

a Laboratorio de Plaguicidas y Salud, Universidad del Quindío, Colombia.
*Autor de correspondencia: Imleon@uniquindio.edu.co

Palabras Claves: Polinizadores; indicadores ambientales; agroquímicos.

La economía de Colombia depende en gran parte del desarrollo del sector agrícola, en especial en el departamento del Quindío, teniendo en cuenta que al aumentar la producción hay un aumento directo de competitividad en el campo y en los diferentes sectores productivos, ambos contribuyendo al incremento económico del país.

El Departamento del Quindío se caracteriza por tener una amplia biodiversidad en cuanto a fauna y flora, así mismo hay una gran biodiversidad agrícola y de otros organismos que contribuyes a la productividad y sostenibilidad para la región. Entre ellos están los polinizadores, que son los animales encargados de transportar el polen y asegurar la formación de los diferentes frutos y semillas que conocemos en la canasta familiar.

Actualmente existe una amenaza para las diferentes especies que ofrecen el servicio de polinización gratuito reflejándose en el declive de estas especies. La pérdida de hábitats y la sobreexplotación son algunos de los causantes de este fenómeno a nivel mundial.

La abeja es un vindicador que al estar en contacto con los diferentes sectores medioambientales nos pueden brindar la información para conocer el estado del ambiente que las rodea, ya que durante su pecoreo o búsqueda de alimento puede explorar grandes distancias, abarcando áreas de aproximadamente 5 Km², es por esta razón que realizando análisis de diferentes contaminantes como plaguicidas por diferentes métodos cromatograficos podemos evaluar también el nivel de trazas de los diferentes agroquímicos en los alimentos que consumimos.



OBSERVACIÓN DEL FERROMAGNETISMO A LA NANOESCALA: MICROSCOPIA LORENTZ Y HOLOGRAFÍA ELECTRÓNICA

Luis Alfredo Rodríguez a*.

^a Departamento de Física – Universidad del Valle. Cali, Colombia. * Autor de correspondencia: <u>luis.a.rodriguez@correounivalle.edu.co</u>

En la actualidad, existe un gran apogeo por el estudio de materiales ferromagnéticos a escala nanométrica debido a las necesidades que se desean cubrir en las áreas de espintrónica y nanotecnología tales como el almacenamiento de información, operaciones lógicas o sensores, empleando sistemas no volátiles y a escalas reducidas. Adicionalmente, gran parte de los fenómenos magnéticos observados mediante medidas macroscópicas tienen como origen mecanismos microscópicos que sólo pueden ser estudiados si utilizamos técnicas que sean sensibles al magnetismo local con resoluciones nanométricas. En esta charla se presentará los aspectos básicos de las dos técnicas más empleadas en un microscopio electrónico de transmisión (TEM) para estudiar materiales magnéticos: microscopia Lorentz y holografía electrónica [1]. Adicionalmente se presentará algunos de los resultados más relevantes obtenidos empleando estas dos técnicas.

[1] L. A. Rodríguez, In situ Lorentz Microscopy and Electron Holography in Magnetic Nanostructures. Tesis Doctoral. Université Toulouse III Paul Sabatier y Universidad de Zaragoza, 2014. https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01789430

INTOXICACIÓN POR METALES PESADOS (UNA MUERTE POCO PERCIBIDA)

Milton Gómez Barrera a*.

^a Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías, Programa de Química.

Universidad del Quindío, Colombia.

* Autor de correspondencia: miltongoba@uniquindio.edu.co

La calidad del medio ambiente se viene deteriorando a un ritmo acelerado por la actividad de la especie humana, sobre las tres matrices en las que coexistimos con las demás especies, aire, agua y suelo. En nuestro medio se están aumentando de manera significativa las intoxicaciones por metales pesados según lo reportan los informes epidemiológicos nacionales (Sivigila). Siendo la vía respiratoria, oral y desconocida las de mayor incidencia. Muchas de las enfermedades causadas por estos elementos son ocupacionales como la debida al plomo por la reparación de baterías, soldadura y plomería, al cadmio en la elaboración de baterías recargables Ni/Cd, fabricación de fertilizantes, detergentes, pinturas, las debidas al Cromo por descargas de efluentes industriales o de la industria radioelectrónica o efluentes de torres refrigerantes, uno de los de mayor impacto es el mercurio por su utilización en actividades extractivas mineras de oro, plata y cobre. El principal problema de este tipo de intoxicación es debido a sus características de persistencia, bioacumulación, biotransformación que puede ser fatales para quienes estén en contacto con este tipo de metales debido a su baja degradación natural, ya que pueden provocar enfermedades catastróficas como el cáncer, son teratogénicas, provocan temblores, gingivitis, aborto espontaneo, perdida de la memoria y otra gran cantidad de impactos nocivos para la salud, no solamente de los humanos sino de otras especies. En el presente trabajo se busca sensibilizar a la comunidad de los peligros de entrar en contacto con estos elementos y socializar algunos de los métodos que se pueden emplear para recuperar algunos de los metales de las matrices en las que los podemos detectar.

En Colombia se han reportado entre el año 2013 y 2015 por intoxicación con mercurio, los departamentos más afectados por la utilización ilegal del mercurio son: Antioquia con 312 casos, Chocó 218, Córdoba 206, Bolívar 167 y Sucre con un total de 143. Por su parte, el municipio más impactado es Ayapel en Córdoba con 139 registros. Le siguen los antioqueños Caucasia, con 125 registros (11% del país) y El Bagre, con 78 (7% del país). El mercurio es tóxico tanto en animales como en humanos, ya que es capaz de suprimir la función biológica del selenio y con ello contribuir a provocar una desregularización del sistema inmunitario en personas muy sensibles. Algunos de los síntomas de su exceso son: pérdida de apetito; disminución del sentido del tacto, auditivo y visión; gusto metálico en la boca, fatiga, depresión, inestabilidad emocional y pérdida de memoria. El plomo es otro de los metales que se encuentra asociado con unas 256,000 muertes prematuras por enfermedades cardiovasculares ocurridas en los E.E.U.U., incluidas 185,000 muertes por cardiopatía isquémica, pueden estar vinculadas con la exposición histórica al plomo en grupos de adultos, tanto de mediana edad como de adultos mayores, no menos peligroso es el Cadmio sus efectos dañinos se pueden ver a nivel neuronal, respiratorio, cardiovascular y óseo. La retención de este mineral produce hipertensión, anemia microcítica hipocrómica (que no responde a la administración de hierro) y proteinuria con excreción anormalmente elevada de B-2 microglobulina. El Aluminio puede acumularse en las neuronas e incidir en la aparición de enfermedades como el Alzheimer, también puede provocar fatiga, baja de fósforo en la sangre y porfirina. El Arsénico con una exposición prolongada a este metal afectaría al sistema nervioso periférico, y a los sistemas cardiovascular y hematopoyético, asimismo, podría provocar osteomalacia, debilitamiento muscular, vómitos, diarreas, dermatitis y cáncer de piel. Hombre y animales están expuestos al Cr por vía inhalatoria (aire, humo del tabaco), por la piel o por ingestión (productos agrícolas, agua). El mayor peligro profesional ha sido el procesamiento del metal de cromita para producir cromatos (Cr+6), se encontró que los trabajadores tenían una frecuencia elevada de cáncer pulmonar.





Por las consideraciones anteriores es imperativo evitar que los seres humanos y todos los seres vivos no entren en contacto con estos elementos que aunque se encuentran en la naturaleza pueden ocasionar daños irreversibles o enfermedades catastróficas cuando se acumulan en el organismo que los consume, por lo que se deben emprender acciones para retirarlos de las fuentes hídricas, en el presente trabajo se exponen los resultados un trabajo de investigación que consistió en la síntesis de unos adsorbentes de bajo costo, obtenidos a partir de compuestos polifenólicos que se encuentran en la cáscara de Musa paradisiaca de los que se emplearon métodos de preparación de resinas novolacas y resoles, para ser usadas como adsorbentes para retener Pb++, Ni++ y Cr+++. Para la valoración de las propiedades de las resinas se realizaron análisis térmicos por DSC y por TGA, análisis espectral por IR-RD, la capacidad de retención de los metales se hizo por Absorción Atómica, dando unos resultados muy significativos del 94,11 % para Cromo, 76,01 para plomo y 99,14 para Niquel, mostrando resultados que puede ser una alternativa para depurar fuentes hídricas de la presencia de estos contaminantes.

NANOBIOTECNOLOGÍA PARA EL TRATAMIENTO DE CÁNCER

Patricia Landázuri a*

^a Programa de Medicina, Doctorado en Ciencias Biomédicas, Facultad de Ciencias de la Salud, Universidad del Quindío.

* Autor de correspondencia: plandazu@uniquindio.edu.co

* Autor de correspondencia: plandazu@uniquindio.edu.co

El cáncer es una enfermedad letal en la que un grupo de células se multiplica de manera incontrolada, desviándose de los principios normales de la división celular. En todas las células de mamíferos hay redes moleculares que son expresión de genes que controlan la proliferación, diferenciación y muerte celular; las alteraciones en estas redes moleculares pueden ocurrir por cambios o mutaciones en el genoma celular.

La literatura muestra un sin número de genes asociados al control del crecimiento celular, mutaciones en estos genes ocurriendo en un grupo determinado de células por mucho tiempo puede llevar a la malignidad. Los genes que se han asociado al crecimiento del cáncer son los oncogenes, genes supresores de tumores y genes reparadores del ADN entre otros.

El tratamiento del cáncer incluye cirugía, radiación, quimioterapia, inmunoterapia y una combinación de ello; sin embargo, a menudo estas terapias causan efectos secundarios; estos se deben a la falta de selectividad del agente terapéutico, a lo indiscriminado de su distribución y los procedimientos invasivos. Para aliviar estos problemas, la investigación en cáncer se está centrando en la nanotecnología para diseñar herramientas de prevención, diagnóstico y tratamiento, explotando las características del microambiente tumoral y del advenimiento de la nanomedicina, donde los agentes terapéuticos pueden encapsularse en materiales nanoparticulados y administrarse selectivamente a los tumores a través de diferentes mecanismos. Las ventajas de la nanomedicina entre otras son: disminuir la concentración del fármaco en el tejido normal, concentrar el fármaco en el sitio objetivo, mejorar su solubilidad y biocompatiobilidad y minimizar la degradación del fármaco.

Varios manomateriales se usan en nanomedicina para encapsular y enviar fármacos; así, nanotubos de carbono, puntos cuánticos, dendrímeros, nanopartículas metálicas, liposomas, micelas, nanogeles, nanoemulsioness, nanopartículas poliméricas (NPs), NPs-oro y NPs-magneticas entre otras, pueden diseñarse con propiedades de biorreconocimiento para la aplicación de fármacos, además de su uso en la detección del cáncer y diagnóstico clínico.

Los retos para el futuro de la nanotecnología en medicina estarán en mejorar su eficacia reducir costos y efectos colaterales y mejorar la forma de suministro al paciente. en tales circunstancias, los principios de direccionamiento de medicamentos deben considerar de manera similar la especificidad de entrega y la solidez fisicoquímica de las nanopartículas en órganos, tejidos y niveles celulares. Pero además se requerirá procesos de formulación para las nanopartículas con el fin de proteger sus atributos fisicoquímicos y biológicos de las condiciones específicas de la vía de suministro, por ejemplo, cambios drásticos de pH y enzimas en la vía digestiva.



NUEVOS MATERIALES INSPIRADOS EN SISTEMAS BIOINORGÁNICOS

Yenny Ávila- Torres a*.

a Grupo QUIBIO; Facultad de Ciencias Básicas, Universidad Santiago de Cali, Colombia.
*Autor de correspondencia: yennytorres@usc.edu.co

Palabras Claves: SPME-HPLC-FLD; interfaz SPME-HPLC; hidrocarburos aromáticos polinucleares; extracción dinámica por HPLC-SPME.

La química bioinorgánica es una ciencia interdisciplinar en desarrollo, la cual nos permite diseñar, proponer y sintetizar modelos funcionales o estructurales de procesos biológicos que se extrapolan a diversas aplicaciones o necesidades ambientales. En este contexto, la búsqueda de nuevos sistemas que mejoren nuestras condiciones de vida a nivel energético y salud ambiental, se consolidan a partir del análisis sistemático de la naturaleza que nos rodea. Metaloenzimas con centros metálicos de hierro, manganeso y cobre tipo oxidasas, participan en procesos de transporte, almacenamiento de oxígeno molecular, transferencia de electrones y fijación de nitrógeno. Estos mecanismos electrónicos permiten proponer a escala macro, nuevos materiales bioinspirados con propiedades físicas emulables. Es el caso de metaloenzimas del grupo HEMO con estructuras asociadas a materiales fotosensibilizados, que se aplican en nuevos desarrollos en celdas solares. Nuestro grupo de investigación se ha centrado en macrociclos derivados de benzoditiofenos a los cuales se les ha evaluado parámetros ópticos, electrónicos y fotovoltaicos a nivel teórico y experimental en función de proponer nuevos sistemas metal- orgánicos con ventajas tecnológicas. Otro tipo de aplicación de este tipo de metaloenzimas, es el diseño estratégico de nuevos materiales antimicrobianos, de tipo mononuclear, dinuclear o polinuclear; capaces de generar radicales libres obtenidos a partir de procesos de oxidación avanzada. En estos sistemas, el centro metálico adquiere importancia ya que desencadena procesos de oxidación activados fotoquímicamente y su facilidad de coordinación a matrices poliméricas, propicia nuevos desarrollos como superficies autolimpiantes. Dentro de las matrices poliméricas exitosas que se han usado, se encuentran quitosano, polietileno y poliuretano en las cuales es embebido el ion metálico de cobre(II), cobalto(II) y manganeso(II) como nanopartícula o compuesto de coordinación. Los resultados contra microorganismos como Staphylococcus aureus y Escherichia coli han sido comparados con antibióticos clásicos, mostrando mejores condiciones y ciclos de reuso reproducibles. La química bioinorgánica es una ciencia transversal que busca comprender los procesos biológicos y encuentra en esa comprensión su extrapolación al diseño estratégico de aplicaciones industriales, problemas ambientales y síntesis de nuevos fármacos.

IX SIMPOSIO DE QUÍMICA APLICADA (IX SIQUIA) Y I CONGRESO INTERNACIONAL DE NANOQUÍMICA, NANOFÍSICA Y NANOMEDICINA (I CINNN)

LA CIDRA... UNA MATRIZ VEGETAL DESCONOCIDA

Clara M. Mejia

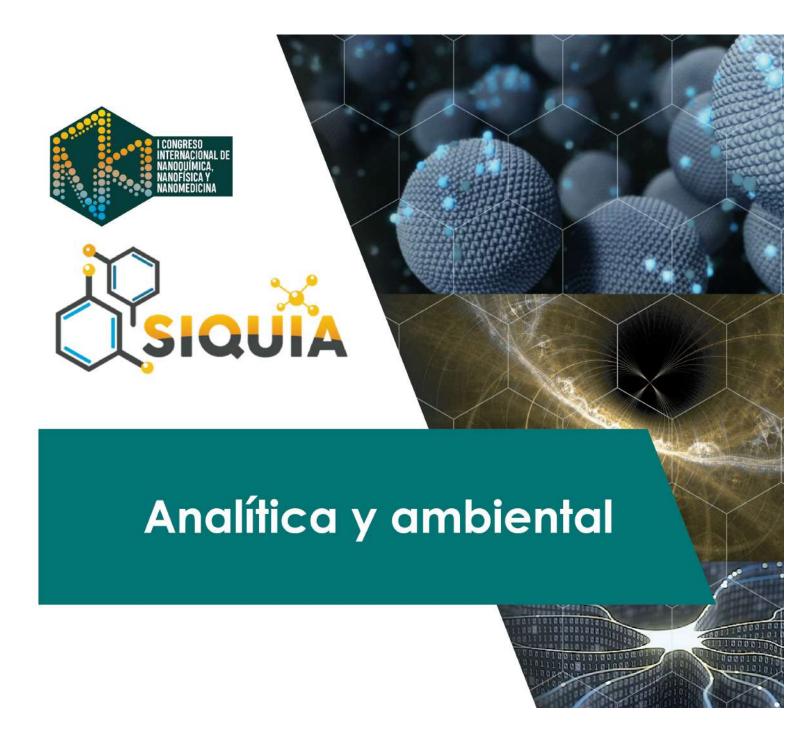
Grupo de Agroindustria de Frutras Tropicales; Programa de Quimica, Facultad de Ciencias Basicas y Tecnologias, Universidad del Quindio.

* Autor de correspondencia: cmmejia@uniquindio.edu.co

La cidra *Sechium edule* (Jacq.) Sw. es una hortaliza de origen Mesoamericano que pertenece a la familia Curcurbitacea. Es de fácil acceso y se adapta a casi cualquier clima. En Colombia se utiliza principalmente para alimento animal; a pesar de su potencial como matriz vegetal para su modificación e incrementar sus componentes nutricionales y ser consumida por los humanos. Por lo anterior, el Grupo de Investigación Agroindustria de Frutas Tropicales de la Universidad del Quindío en los últimos años ha venido realizando investigaciones que demuestran su capacidad de ser usada como vehículo de compuestos bioactivos como antioxidantes utilizando diferentes pulpas de frutas, adición de probióticos, calcio e inulina, además de metodologías de secado que permiten diseñar *snacks* con diferentes geometrías. Así mismo, se ha estudiado su microestructura, encontrando diferentes compuestos que pueden ser extraídos y empleados por las diferentes industrias. Es importante indicar que existen 7 ecotipos diferenciados por su color, tamaño y forma, los cuales deben ser estudiados y determinar las diferencias con el ecotipo que se ha venido analizando, verde claro liso.







VALORIZACIÓN DE CO₂ POR CONVERSIÓN ELECTROCATALÍTICA CON CATALIZADORES BIMETÁLICOS USANDO COMO SOPORTE GRAFENO

Laura V. Peña-González ^a, Heidy V. Vargas-Pinto ^a, María J. Illan —Gómez ^b, Franz E. López-Suárez ^{a*}.

^a Grupo de investigación "Ingeniería de Procesos y Sistemas industrial", Ingeniería química,

Universidad Jorge Tadeo Lozano, Colombia.

^b Grupo de investigación "Materiales Carbonosos y Medio Ambiente (MCMA"), Química, Inorgánica,

Universidad de Alicante (España.)

*Autor de correspondencia: franze lopezs@utadeo.edu.co

Palabras Claves: CO₂; electrocatalizadores; grafeno; materiales carbonosos.

La conversión electroquímica de CO₂ a hidrocarburos es una propuesta para la reducción de este gas en el medio ambiente. Sin embargo, es poco eficiente debido al alto costo energético que se necesita. Debido a esto, se investiga la manera de implementar catalizadores que mejoren la eficiencia en la conversión en celdas electroquímicas. En este estudio se sintetizaron electrocatalizadores de cobre y cobalto usando como soporte grafeno reducido (RG), fabricado a partir de grafito electroquímico. En la síntesis de RG se utilizó el método de Hummer modificado para el proceso de oxidación y se obtuvo grafeno reducido usando borohidruro de sodio como agente reductor. El comportamiento electroquímico y su conductividad fue evaluado a través de voltametría cíclica y sus características físico – químicas fueron estudiadas por medio de FTIR, XPS, DRX y RAMAN. Electrocatalizadores son sintetizados depositando los metales por medio de impregnación humedad incipiente. Los soportes sintetizados presentan las características deseadas para ser usados como soporte de los electrocatalizadores, buena conductividad eléctrica y características físico – químicas de grafeno. Se prueba sí su viabilidad como soportes en la síntesis de electrocatalizadores bimetalicos para la conversión de dióxido de carbono. Adicional a esto los electrocatalizadores fueron evaluados por eletroconversion de CO₂.



EVALUACIÓN DEL POTENCIAL DE LIMPIEZA DE MUESTRAS DE CARBÓN CON ALTO CONTENIDO DE MATERIA MINERAL A PARTIR DE UNA COLUMNA DE FLOTACIÓN

Jorge L. Piñeres a*, Geraldine P. Ariza a, Marley C. Vanegas a.

^a Grupo de Simulación y Transformación del Carbón, Programa de Ingeniería Química, Universidad del Atlántico,

Carrera ³⁰ Número ⁸-⁴⁹, Puerto Colombia (Atlántico), Colombia

* Autor de correspondencia: jorgepineres@mail.uniatlantico.edu.co

Palabras Claves: Flotación, pH, concentración de espumante, diseño experimental

Este estudio muestra el efecto que ejercen sobre la recuperación másica y la reducción del contenido de materia mineral en dos muestras de carbón (M1 y M2) las variables: pH, concentración de espumante (FC) y concentración de colector (CC), en un proceso de flotación, se utilizó un diseño experimental factorial 2³ central compuesto para evaluar el efecto de las condiciones usadas en la columna de flotación1. Las muestras se procesaron usando un rango de pH entre 3 y 11, concentración de espumante (FC) entre 1.58 y 4.75 lb/ton y concentración de colector (CC) entre 1.41 y 4.23 lb/ton. Los resultados mostraron que la muestra M1 presentó un máximo porcentaje de recuperación másica del 93.76%, a pH neutro (pH 7), con FC de 3.46 lb/ton y 4.40 lb/ton de CC, mientras que la muestra M2 presentó la mayor recuperación másica (98.36%) a pH neutro (pH 7), FC de 1.58 lb/ton y 2.82 lb/ton de CC. Para la muestra M1, la máxima reducción del contenido de cenizas fue de 48.73% en condiciones ácidas (pH 3) con FC de 3.46 lb/ton y 2.93 lb/ton de CC, mientras que la muestra M2 mostró una alta reducción del contenido de cenizas (72.95%) en condiciones ácidas (pH 3) con FC 3.16 lb/ton y 2.82 lb/ton de CC. En general, se observó que la muestra M2 presentó valores altos de recuperación másica y reducción del contenido de cenizas comparados con la muestra M1, a las mismas condiciones.

LIMPIEZA DE CARBÓN A PARTIR DE UNA COLUMNA DE FLOTACIÓN

<u>Jorge L. Piñeres</u> ^{a*}, Silvia P. Bellich ^a, Juan M. Barraza ^b.

^a Grupo de Simulación y Transformación del Carbón, Programa de Ingeniería Química, Universidad del Atlántico,

Carrera ³⁰ Número ⁸-⁴⁹, Puerto Colombia (Atlántico), Colombia

^b Grupo de Ciencia y Tecnología del Carbón, Escuela de Ingeniería Química, Universidad del Valle,

Ciudadela Universitaria Meléndez, Cali, Colombia

* Autor de correspondencia: jorgepineres@mail.uniatlantico.edu.co

Palabras Claves: Flotación, concentración de colector, concentración de espumante, diseño experimental, carbón

El carbón es considerado como una mezcla de materiales orgánicos e inorgánicos. La fracción inorgánica está formada por la materia mineral, el cual es un factor de suma importancia a la hora de establecer la calidad de un carbón. Entre menor sea el contenido de materia inorgánica de una muestra mayor es su poder calorífico, por lo tanto, se considera de buena calidad. Con el fin de mejorar el desempeño del carbón se han desarrollado diferentes técnicas de beneficio, entre estas se puede destacar la flotación en columna. En el presente estudio se presenta el procedimiento de diseño de una columna de flotación y la evaluación de su eficiencia y selectividad. La muestra utilizada en el proyecto presentaba un porcentaje de ceniza en base seca del 3,97%. Por medio de un diseño experimental factorial 2² se analizó el efecto de la concentración de espumante y colector sobre el rendimiento másico y la reducción del porcentaje de materia mineral. Los resultados arrojados fueron recuperaciones másicas superiores al 80% (84,63% - 98,39%) y una reducción de la materia mineral de hasta el 83,75%, correspondiendo este último valor a un porcentaje de ceniza en base seca del 0,65%. Es de resaltar que estos resultados fueron obtenidos en una sola etapa del proceso y sin llevar a cabo ningún tipo de ataque químico.



TRANSFORMACIÓN DE LOS RESIDUOS DE BATERÍAS NÍQUEL HIDRURO METÁLICO EN ALEACIONES BASE ALUMINIO EMPLEANDO UN PROCEDIMIENTO DE FUNDICIÓN REACTIVA

Lina I. Sánchez-González a, Pedro Delvasto a*.

^a Escuela de Ingeniería Metalúrgica y Ciencia de Materiales, Universidad Industrial de Santander, Colombia.

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

Palabras Claves: Residuos; reciclaje; baterías; fundición; reducción metalotérmica.

Las baterías domésticas gastadas constituyen residuos especiales, debido a su elevado contenido en metales potencialmente tóxicos. De los distintos tipos de baterías disponibles, las baterías recargables del tipo níquel hidruro metálico (Ni-MH) merecen especial atención, pues el níquel es un metal reconocido por su ecotoxicidad y cuyo precio de mercado es elevado, razón por la cual su recuperación conlleva ventajas ambientales y al mismo tiempo económicas. En el presente trabajo se propone una metodología, denominada fundición reactiva, para tratar residuos de baterías desechadas del tipo Ni-MH y producir aleaciones de aluminio que incorporan níquel. El proceso inicia con la recolección manual de las baterías en los contenedores de residuos electrónicos de la Universidad Industrial de Santander, sede Bucaramanga. Las baterías se sometieron a un proceso de descarga y se desensamblaron de forma manual, para recobrar de su interior los polvos electródicos. La caracterización por difracción de rayos x (XRD) de dichos polvos indicó que se trata de una combinación de NiO(OH), Ni(OH), y una aleación de níquel con elementos tierras raras. Se confeccionó una mezcla reactiva combinando los polvos electródicos recuperados (13 g) con una sustancia fundente (13 g). Los fundentes utilizados fueron bórax, Na₂[B₄O₅(OH)₄]·8H₂O₅ y fluoruro cálcico, CaF₂. La mezcla reactiva (26 g) se colocó encima de lingotes de 60 g de aluminio con pureza comercial (c. 99,7% Al) y se llevaron a fusión en mufla a 1000 °C durante 1 hora, en crisoles de arcilla refractaria. Debido a que el aluminio es un metal activo, capaz reducir a los óxidos de níquel, al final del proceso se obtienen dos productos, una fase metálica, denominada lingote aleado, y una fase escoria la cual está formada por mezcla no reaccionada y óxidos de aluminio. Los análisis químicos mediante espectroscopía de emisión óptica (OES) de los lingotes aleados obtenidos indicaron que, al emplear bórax en la mezcla, se logra la incorporación de níquel a la aleación, incrementándose al menos 12 veces el contenido inicial de Ni presente en el aluminio de partida. El CaF₂, por el contrario, no facilitó la incorporación de níquel a la aleación.

APLICACIÓN DE LA METODOLOGÍA DE SUPERFICIE DE RESPUES-TA PARA LA REMOCIÓN DE COLORANTES EN AGUAS RESIDUALES INDUSTRIALES CON CARBÓN DE LLANTA COMO ADSORBENTE

Sebastian Amar Gil a, Erasmo A. Villaseñor a, Rolando Barrera Z. b, Alba N. Ardila A. a*.

a Grupo de Investigación CAMER, Politécnico Colombiano Jaime Isaza Cadavid, Colombia Grupo de Investigación CERES Agroindustria & Ingeniería, Universidad de Antioquia, Colombia *Autor de correspondencia: anardila@elpoli.edu.co

Palabras Claves: Adsorbente; carbón de llanta; aguas residuales; colorantes.

En la actualidad, los colorantes son empleados en distintas industrias como textil, cuero, plástico y productos farmacéuticos. La presencia de colorantes en los efluentes incrementa la DQO y contribuye a problemas sociales, de salud pública y ambientales. Recientemente se han evaluado distintos proesos de descontaminación de aguas, donde, la técnica de adsorción con carbón de llanta ha demostrado gran efectividad en la adsorción de diferentes contaminantes.

Los carbones se obtuvieron de gránulos de caucho de llantas a través de pirólisis con activación con CO₂ a 500 °C (Tipo I) y 700 °C (Tipo IV) y sin activación a 500 °C (Tipo III) y 700 °C (Tipo IV). La optimización se desarrolló con un diseño Box-Behnken, donde se evaluaron tres parámetros de proceso (pH, temperatura, cantidad de adsorbente) usando una solución de tinción simulada con 100 ppm de colorante (Rojo Reactivo 250, Amarillo Reactivo 145 y/o Azul Reactivo 21) por 24 horas. Los porcentajes de remoción de colorante obtenidos varían en un rango de 29.31 a 99.55% para el rojo reactivo 250, de 33.66 a 98.01% para el amarillo reactivo 145 y de 43.36 a 100.00% para el azul reactivo 21, según el tipo de adsorbente de llanta empleado y las condiciones evaluadas. Los resultados de ANOVA, indican que los parámetros analizados influyen significativamente en los porcentajes de remoción de cada colorante (%R). Por el contrario, el tratamiento aplicado al adsorbente no afectó considerablemente los %R, obteniéndose resultados muy similares para el adsorbente sin activación y activado. Adicionalmente, tampoco se observó diferencias significativas con los adsorbentes obtenidos a diferentes temperaturas. Para los tres colorantes, los %R incrementan con el aumento en la cantidad de adsorbente y con la diminución del pH y la temperatura. Los mejores resultados para el rojo 250 (97%), amarillo 145 (96%) y azul 21 (100%), se obtuvieron con 80 mg del adsorbente tipo III, 95 mg del adsorbente tipo III y 100 mg del adsorbente tipo I, respectivamente. Para todos los casos los mejores resultados se obtuvieron a 25°C y pH de 3.0. De forma similar en los resultados de caracterización fisicoquímica y espectroscópica de los adsorbentes activados y sin activar a diferentes temperaturas, no se observan diferencias significativas, con lo cual se podría explicar el porqué de la similitud en los %R de los colorantes con los materiales evaluados. Se evaluó las mejores condiciones de adsorción en la remoción de colorantes presentes en un agua residual real compleja de una industria textil, obteniéndose porcentajes de remoción en términos de la absorbancia mayores (~51%) que los obtenidos con el carbón activado comercial (~18%).



BIOCARBÓN DE CÁSCARA DE NARANJA: UNA ALTERNATIVA SUS-TENTABLE PARA LA REMOCIÓN DE COLORANTES DE AGUAS RE-SIDUALES DE LA INDUSTRIA TEXTIL

<u>Verónica Avendaño G.</u> ^a, Santiago A. Bedoya B. ^a, Erasmo Arriola V. ^c, Rolando Barrera Z. ^a, Alba N. Ardila A. ^{a*}. ^a Grupo de Investigación CAMER, Politécnico Colombiano Jaime Isaza Cadavid, Carrera ⁴⁸ No. ⁷-¹⁵¹, Medellín, Colombia. CP ⁴⁹³². ³ Grupo de Investigación CERES, Facultad de Ingeniería, Universidad de Antioquia UdeA, Calle ⁷⁰ No. ⁵²-²¹, Medellín Colombia. *Autor de correspondencia: anardila@elpoli.edu.co

Palabras Claves: Colorantes; adsorción; biocarbón; cascara de naranja; aguas residuales.

En este trabajo se optimizaron tres parámetros de proceso: pH (3,7 y 12), temperatura (25, 35 y 45°C) y cantidad de bioadsorbente (25, 50 y 100 mg), en la remoción de colorantes presentes en un agua residual industrial usando dos biocarbones (NCT₁ y NCT₂) obtenidos por pirólisis a 500 °C y 700°C, respectivamente, a partir de cáscaras de naranja. Para los experimentos de adsorción por 24 horas, se simuló la composición de un efluente de tinción con 100 ppm de cada colorante (rojo reactivo 250, amarillo reactivo 145 y azul reactivo 21). Se realizó un análisis de varianza (ANOVA) de los resultados obtenidos con un nivel de confianza del 95%.

Los mejores porcentajes de remoción (%R) de cada colorante con el bioadsorbente NCT1 fueron: 89.6 % (rojo 250), 70.2 % (amarillo 145) y 88.5 % (azul 21) con 100 mg de adsorbente a 25°C y pH de 3.0. De forma similar, los mejores resultados con el bioadsorbente NCT2, reflejaron un %R de 95.5 %, 75.0 % y 95.0 %, para el rojo 250, amarillo 145 y azul 21, respectivamente.

Para los tres colorantes los %R incrementan con el aumento en la cantidad de adsorbente y con la diminución del pH y la temperatura. Por otra parte, de acuerdo al análisis de varianza, se obtuvieron valores de P < 0.05, lo cual indica una influencia significativa de los parámetros. Estos resultados se explican debido a interacciones aniónicas en la superficie, la termodinámica de las reacciones y la disponibilidad de sitios activos del material. Se evaluó las mejores condiciones de adsorción en la remoción de colorantes presentes en un agua residual real compleja de una industria textil, obteniéndose porcentajes de remoción en términos de la absorbancia mayores (~33%) que los obtenidos con el carbón activado comercial (~18%). Con los resultados obtenidos se demuestra que la remoción de colorantes en aguas residuales industriales con biocarbón de cáscara de naranja, es una alternativa muy efectiva, factible y ambientalmente amigable. Además, nace de la necesidad de buscar adsorbentes naturales renovables, de fácil disponibilidad, de bajo costo y que tengan un impacto positivo a nivel ambiental y social.

ADSORCIÓN DE CROMO (VI) SOBRE BIOMASA SECA EN POLVO DE EICHHORNIA CRASSIPES

William Álvarez G. a, Alfredo Hernández M. b, Erasmo Arriola V. a, Rolando Barrera Z. c, Alba N. Ardila a*. ^a Grupo de Investigación en Catálisis Ambiental y Energías Renovables (CAMER), Politécnico Colombiano Jaime Isaza Cadavid, Colombia ^b UPIIG, del Instituto Politécnico Nacional, Guanajuato, México.: c Grupo CERES, Facultad de Ingeniería, Universidad de Antioquia, Colombia. * Autor de correspondencia: anardila@elpoli.edu.co

Palabras clave: Adsorción de Cr (VI), Eichhornia crassipes en polvo, contaminación hídrica.

En la presente contribución se evalúa la capacidad del lirio acuático (Eichhornia crassipes) en polvo como bioadsorbente de Cr (VI) presente en aguas residuales. Adicionalmente, se realizan caracterizaciones que permitan estimar parámetros determinantes en la adsorción de Cr (VI), establecer el mecanismo de adsorción del metal sobre el biomaterial y determinar las relaciones fundamentales entre las propiedades fisicoquímicas del bioadsorbente y su capacidad de adsorción.

Para la obtención del polvo a planta se secó en un horno a una temperatura constante de 80 °C por 48 h, la biomasa seca se trituró en un molino de bolas y se tamizó con un tamiz Malla ASTM No. 50, correspondiente a un diámetro de partículas menor de 300 µm. El material caracterizó por DRX, BET, FTIR, SEM y titulación de masa. Las pruebas de adsorción de Cr (VI) se realizaron con 10 g/L de bioadsorbente por 6 horas. Se estudió el efecto del pH, la temperatura y la concentración de Cr (VI).

Los resultados indican que para las diferentes concentraciones iniciales de Cr (VI) y a todas las temperaturas, el porcentaje de remoción de Cr (VI) incrementa con la disminución del pH inicial de la disolución. Adicionalmente, en todos los casos, el incremento en la temperatura favorece el proceso de adsorción y se obtienen mayores porcentajes de remoción de Cr (VI) cuando se utilizan mayores concentraciones iniciales del contaminante. Se obtuvo un valor máximo de 66% a pH = 1.5 y 45°C con 75 ppm de Cr (VI). En cuanto al ajuste de los datos experimentales a diferentes modelos de isotermas, en todos los casos el mejor ajuste de los datos experimentales se obtuvo con la isoterma tipo Freundlich. Las caracterizaciones fisicoquímicas evidencian la presencia de alta cantidad de grupos funcionales superficiales en la pared celular del bio-adsorbente las cuales favorecen el proceso de adsorción de Cr (VI) mediante atracciones electrostáticas y formación de puentes de hidrógeno. Se concluye que el bioadsorbente de Lirio Acuático es una alternativa viable y económica para la rem-Oción de Cr (VI) presente en aguas residuales.



CARACTERIZACIÓN FISICOQUÍMICA Y MICROBIOLÓGICA DE AGUAS MIELES DEL BENEFICIO DEL CAFÉ

Andrea Arango ^a, Laura Sofía Torres-Valenzuela ^a, Johanna Andrea Serna-Jiménez ^a, <u>Alejandra Sanín</u> ^{a*}.

^a Grupo de Investigación GIDA, Universidad La Gran Colombia, Armenia, Colombia

* Autor de correspondencia: torresvallaura@miugca.edu.co

Palabras Claves: Aguas residuales; biocomponentes; café; contaminación; microorganismos

En el proceso de beneficio del café, además de que sólo se aprovecha el 5% del producto fresco, se generan residuos como aguas mieles (AM), que pueden llegar hasta 40 L/Kg de café pergamino seco y al ser vertidas pueden provocar contaminación de alto impacto ambiental. Consecuentemente, el objetivo fue caracterizar fisicoquímica y microbiológicamente dos muestras de AM con el fin de conocer su composición e identificar usos potenciales.

Las AM fueron obtenidas de dos fincas con dos tiempos de fermentación de 14 y 18 horas (en adelante M1 y M2 respectivamente). Se realizó la medición de DQO y nitrógeno mediante kits NA-NOCOLOR®, y amonio y cromo con kits VISOCOLOR®ECO, utilizando un fotómetro para su cuantificación. El oxígeno disuelto (OD) se midió mediante un equipo portátil especializado, pH y conductividad con un potenciómetro y el color empleando un colorímetro. La acidez volátil, fósforo, cloruros, sólidos totales y minerales, siguiendo los métodos oficiales AOAC y los sólidos volátiles por diferencia. También se cuantificaron mesófilos aerobios y anaerobios, coliformes totales y estafilococos por los métodos normalizados para el análisis de aguas APHA-AWWA-WPCF.

Se identificaron diferencias significativas entre las muestras y un efecto del tiempo de fermentación, sobre las características evaluadas. La M2 mostró mayor concentración de OD, conductividad y cambio de color respecto al agua de acueducto (control), mientras que M1 tuvo una mayor concentración para los demás parámetros. Con respecto a cromo y amonio, compuestos altamente nocivos para la salud y el ecosistema, los contenidos estuvieron por debajo del límite detectado por el equipo, sin embargo, la DQO fue superior al valor máximo reglamentado para aguas domésticas. El resultado de OD indica mala calidad del agua para albergar vida. En el análisis microbiológico, se encontraron mesófilos aerobios y anaerobios en ambas muestras, no obstante, la M2 presentó coliformes y estafilococos, posiblemente a causa del agua utilizada para el lavado. Con lo anterior se evidencia que la carga contaminante de las aguas residuales es elevada, por lo cual se requieren alternativas de mitigación y/o posible aprovechamiento de este residuo de la agroindustrial del café.

MATERIALES COMPUESTOS RESIDUALES CON APLICACIONES EN LA INDUSTRIA DE LA CONSTRUCCIÓN

Brandon Suárez^a, Melissa Suárez^a, Yenny P. Ávila^{b*}.

^a QCOMMSB, Facultad de Tecnologías, Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira, Colombia
 ^b QUIBIO, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad Santiago de Cali, Santiago de Cali, Colombia
 * Autor de correspondencia: yennytorres@usc.edu.co

Palabras Claves: Material compuesto, polímeros residuales, residuos agroindustriales e industriales, construcción.

La necesidad de desarrollar y comercializar materiales que contengan fibras vegetales ha crecido para reducir el impacto ambiental y alcanzar la sostenibilidad. Recientemente, estos constituyentes se han utilizado en diferentes aplicaciones; en particular, la celulosa ha sido objeto de numerosos trabajos sobre el desarrollo de materiales compuestos reforzados con fibras naturales con mejorías en las propiedades mecánicas, físicas y térmicas. Por otra parte, y en consecuencia con los altos costos de materias primas en la construcción, así como altos índices de contaminación proveniente del plástico resulta importante desarrollar nuevos materiales a partir de residuos post-industriales como el PET, PP y PPFV (polvo poliéster de fibra de vidrio) con los que se logre además mayor rentabilidad económica. Este proyecto presenta una visión industrial en conjunto con la agricultura abordando un problema general de interacción entre productos (cadena agroindustrial de la planta de plátano y reutilización de residuos poliméricos convencionales e industriales) que funcionan dentro de un contexto sostenible y una propuesta ambientalmente amigable. Se llevó a cabo el desarrollo de dos materiales compuestos óptimos: celulosa del plátano-PET (M1), celulosa plátano-PP (M2) y Polvo poliéster de fibra de vidrio- polietileno (M3); mezclándolos a partir del proceso de extrusión monohusillo, caracterizando química, espectroscópica y mecánicamente. Posteriormente, se realizó el diseño industrial de un prototipo de teja en términos de reúso ambiental, producidas con los materiales compuestos sintetizados con dimensiones comerciales.

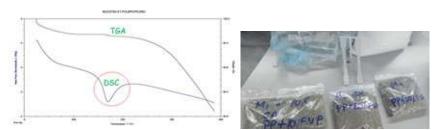


Figura 1. a). TGA y DSC de M1, b). Pellets de M1



DETERMINACIÓN DE TRIHALOMETANOS EN AGUAS DE PISCINAS POR CROMATOGRAFÍA DE GASES CON DETECTOR DE MICROCAPTURA DE ELECTRONES

<u>William A Hernádez-Herrera</u>^a, Olga I Vallejo-Vargas^a, Juan C González^b, Carlos H Montoya-Navarrete^b, Paola A Fontal-Vargas^b, Leonardo Beltrán-Angarita^{a,b*}.

^a Escuela de Tecnología Química, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.
 ^b Facultad Ciencias de la Salud, Unidad Central del Valle del Cauca, Colombia
 *Autor de correspondencia: lbeltran@uceva.edu.co

Palabras Claves: Trihalometanos; cromatografía de gases; piscinas; subproducto de cloración.

La desinfección del agua con cloro, genera subproductos como los trihalometanos (THM's), a los cuales se les atribuyen propiedades cancerígenas y con un potencial efecto adverso en el sistema reproductivo. En este estudio un método simple, rápido y libre de solventes fue estandarizado para la determinación de THM's en aguas de piscinas utilizando microextracción en fase sólida con espacio de cabeza combinada con cromatografía de gases con detector de micro captura de electrones y utilizado para la cuantificación de THM's en aguas de piscinas. Parámetros experimentales, así como el tiempo de adsorción, la temperatura de adsorción y desorción, la agitación de la muestra y la adición de NaCl fueron estudiados. Se determinaron los límites de detección y cuantificación del método y se realizó el análisis de los trihalometanos de 15 muestras de agua de 3 piscinas. Las condiciones optimizadas fueron 20 min de extracción a 37 °C en presencia de 25% de NaCl y con una agitación de 200 rpm; con tiempo de desorción de 4 min a 250 °C. El rango lineal de 5-200 mg/L fue establecido con una desviación estándar relativa (%RSD) en el rango 6,1-10,1 %. Los límites de detección estuvieron en el rango desde 3,8 a 7,8 mg/L. El promedio de la concentración de THM's en agua de piscinas fueron de 280, 350 y 1150 mg/L. Las concentraciones encontradas en las muestras evaluadas indican la necesidad de realizar más estudios para prevenir su formación y la posible incorporación de un límite máximo permitido en la normatividad nacional.

DETERMINACIÓN DE TRICLOSÁN POR SORCIÓN EN DISCO ROTATORIO EN MUESTRAS DE AGUA UTILIZANDO MONTMORILLONITA INTERCALADA CON LÍQUIDOS IÓNICOS COMO FASE ABSORBENTE

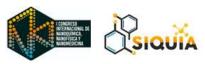
Jhon F. Ríos Coral ^a, Andrea B. Camacho Forero ^a, Lizbeth L. López Parra ^a, <u>Jhon J. Ríos Acevedo</u> ^a*.

^a Facultad de Ciencias Básicas, Universidad Santiago de Cali, Colombia

* Autor de correspondencia: jhon rios04@usc.edu.co

Palabras Claves: triclosan; RDSE; montmorillonita; líquidos iónicos; SPE.

En los últimos años la preparación de muestras mediante técnicas miniaturizadas ha ganado una gran atención en la comunidad científica, ya que estas metodologías cumplen con los preceptos de la química verde, lo que ha conducido a una creciente aplicación en una variedad cada vez mayor de compuestos orgánicos. En las técnicas que involucran microextracción, la fase sorbente es un componente esencial, por lo que la búsqueda de nuevas fases que sean más afines a los compuestos de interés es un desafío. La arcilla Montmorillonita (MMT) es un material ecológico abundante en el planeta y es una buena opción para extraer compuestos orgánicos. En este estudio, se desarrolló una nueva aplicación para la extracción de Triclosán (TCS) en muestras de aguas mediante extracción con disco rotatorio (RDSE) utilizando como fase sorbente Montmorillonita modificada con el líquido iónico 1-hexadecil-3-metilimidazolio bromuro (MMT-Br). La determinación final del TCS se realizó mediante cromatografía de líquidos de alta eficiencia (HPLC) con detección de matriz de diodos fotométricos (PDA). Se obtuvieron características analíticas satisfactorias utilizando la técnica RDSE con fase sorbente MMT-Br, para un volumen de muestra de 5,0 mL a pH de 5 y a 800 rpm de agitación; el tiempo óptimo de extracción se fijó en 60 minutos. Las recuperaciones relativas de una muestra de aguas fueron superiores al 80%, el límite de detección fue 0,203±0,006 mg L⁻¹ y la precisión expresada como la desviación estándar relativa de 3%. Bajo las condiciones de extracción optimizadas, esta nueva metodología se aplicó en el análisis de las aguas residuales de una planta de tratamiento Hospitalaria y en la bocatoma de una planta de tratamiento de agua potable. Se encontraron concentraciones no cuantificables de TCS por debajo del límite de cuantificación para la muestra de agua residual Hospitalaria. Se comparó la eficiencia de método propuesto por RDSE con la fase absorbente MMT-Br con el método EPA 1694, basado en la extracción en fase sólida (SPE); los resultados indicaron que no hubo diferencias significativas entre las concentraciones de las medidas de TCS de ambos métodos a un nivel de confianza del 95%, lo que confirmó la eficiencia de la RDSE/ MMT-Br para monitorear las concentraciones de este compuesto en aguas.



EXTRACCIÓN DE CAFEÍNA DE AGUAS MIELES DEL BENEFICIO DEL CAFÉ A TRAVÉS DE SOLVENTES SUPRAMOLECULARES

Laura M. Rivera a*, Laura Sofía Torres-Valenzuela a, Johanna Andrea Serna-Jiménez a.

Grupo de Investigación Agroindustrialización GIDA, Facultad de Ingenierías,
Universidad La Gran Colombia Seccional Armenia, Colombia.

* Autor de correspondencia: riveragarlaura@miugca.edu.co

Palabras Claves: Cafeína; solventes supramoleculares; aguas mieles; coacervación.

Los solventes orgánicos han sido ampliamente usados en química analítica y procesos de extracción; sin embargo, éstos presentan impactos negativos al medio ambiente por los volúmenes de solvente usados, la necesidad de procesos de purificación y el impacto ambiental asociado a su uso y producción. Para superar estos inconvenientes, han surgido los llamados solventes verdes, dentro de los cuales se encuentran los solventes supramoleculares (SUPRAS) que son compuestos formados a través de auto-ensamblaje y coacervación. En este estudio los SUPRAS obtenidos con diferentes anfifilos (hexanol y ácido octanoico) y dos medios hidro-orgánicos (etanol-agua y THF-agua) fueron evaluados para la extracción de cafeina a partir de agua miel obtenida del beneficio húmedo de café variedad caturra. El proceso de extracción fue optimizado en función del tipo de anfifilo, la fase hidro-orgánica y la concentración de estos en las mezclas ternarias y su efecto sobre la eficiencia de extracción de cafeina (cuantificada por cromatografía líquida de alta eficacia). Se obtuvo un buen rendimiento en la extracción de cafeina (hasta un 54%) y se seleccionaron SUPRAS sintetizados con ácido octanoico, debido a que mejoraron la eficiencia de extracción y son compuestos bio-compatibles, generalmente reconocidos como seguros. Respecto al tipo de solvente, se seleccionó el etanol debido a su carácter prótico que favoreció el proceso de extracción y adicionalmente ha sido catalogado como "solvente preferido". Los SUPRAS sintetizados con estos compuestos son una alternativa promisoria para la extracción de cafeina a partir de aguas residuales y método "verde" de aprovechamiento de residuos. Su potencial y alta eficiencia se asocia a su simplicidad, la rapidez de la extracción (5 minutos) y a la viabilidad de realizar el proceso con carencia de energía térmica, por lo cual podrían ser implementados a nivel industrial.

IX SIMPOSIO DE QUÍMICA APLICADA (IX SIQUIA) Y I CONGRESO INTERNACIONAL DE NANOQUÍMICA, NANOFÍSICA Y NANOMEDICINA (I CINNN)

BIOCHEMICAL CONVERSION OF SUGARCANE BAGASSE LIGNIN TO LIPIDS

<u>Luisa F. Henao</u>^a, Carlos M. Pérez ^a, Carlos Álvarez-Vasco ^{a*}

^a Universidad Icesi, Cali, Colombia *Corresponding author: caalvarez@icesi.edu.co

Keywords: Bioconversion; DES lignin; bagasse; lipids; *Rhodococcus opacus*

Sugarcane Bagasse is one of the largest agricultural wastes in the world. In Colombia, approximately 24M tons of sugarcane are produced per year. Sugarcane bagasse represents 30% of the cane, producing 7.2M tons of this residue. This is a fibrous residue, composed of cellulose (49%) hemicellulose (18%) and lignin (22%), obtain after the crushing and extraction of its juice. Nowadays, cellulose and hemicelluloses are extracted by physicochemical treatment for the conversion of high-value products such as bioethanol. However, due to its high recalcitrance, lignin has gotten much less attention as a resource for biofuels production.

The valorization of lignin is an important component of modern biorefinery plants, which offers unique routes to produce new chemical products. Promising microbes and enzymes could be use as biocatalyst to boost lignin conversion and valorization to new and promising products. This study uses a novel method to dissolve lignin from sugar cane bagasse produced in Valle del Cauca - Colombia region using an in-house synthesized deep eutectic solvents (DES).

Considering that lignin is efficiently solubilized in Deep Eutectic Solvents (DES) and *Rhodococcus* opacus converts lignin model compounds into high levels of triacylglycerols through a metabolic route connecting aromatic catabolism with lipid anabolism. A factorial design was used to study the effects of DES type, lignin load and enzymatic pretreatment on lignin uptake by *R. Opacus* as only carbon source to generate lipids. Our research work shows that it is possible to link both worlds taking advantage of an efficient solubilization of lignin (with DES) to its biochemical valorization with promising microbes (*R. opacus*) to obtain promising lipid productivities.



OBTENCIÓN DE BIOCARBÓN DE CÁSCARAS DE BANANO PARA LA REMOCIÓN DE COLORANTES

Yesenia M. Rodríguez ^a, Verónica Ocampo ^a, Alba N. Ardila ^{a*}, Erasmo Arriola ^a.

^a Grupo de Investigación en Catálisis Ambiental y Energías Renovables, Semillero en Gestión Sostenible del Recurso
Hídrico (GESREH), Politécnico Colombiano Jaime Isaza Cadavid, Colombia.

* Autor de correspondencia: anardila@elpoli.edu.co

Palabras Claves: Cáscaras de banano; bioadsorbente; colorantes; aguas residuales; medio ambiente.

Los colorantes representan uno de los principales contaminantes en la actualidad, la mayoría de estos provienen de las industrias cosmética, alimenticia y textil, siendo esta última la que presenta contribuye mayoritariamente a la contaminación de las fuentes hídricas. Muchos de los colorantes y pigmentos industriales poseen características tóxicas y no biodegradables y, por lo tanto, son persistentes en el medio ambiente. En este proyecto se usó como bioadsorbente carbonizados obtenidos por pirólisis a partir de biomasa de cáscara de banano ya que es un residuo agrícola abundante y de bajo costo, además está disponible en grandes cantidades.

El biocarbón se obtuvo por pirólisis a partir de cáscaras de banano a 500 °C. Para las pruebas de adsorción, se simuló la composición de un efluente de tinción con 100 ppm del colorante rojo reactivo 250, amarillo reactivo 145 o azul reactivo 21. Se estudió el efecto del pH (3,7 y 12), la temperatura (25, 35 y 45°C) y la cantidad de bioadsorbente (25, 50 y 100 mg) en el porcentaje de remoción de cada colorante.

Para todos los colorantes evaluados, su porcentaje de remoción (%R) incrementa con el aumento en la cantidad de bioadsorbente y con la diminución del pH, sin embargo, no se observó una relación proporcional en el %R con la variación de la temperatura. De esta manera, el máximo porcentaje de remoción para el rojo 250, amarillo 145 y azul 21 fue de 84%, 69% y 95%, respectivamente, todos con 100 mg de bioadsorbente a 35°C y un pH de 3.0. De acuerdo con el valor obtenido para el punto isoeléctrico del bioadsorbente, se puede inferir que a pH < pHpzc la superficie estará cargada positivamente, favoreciendo la interacción con especies aniónicas a pH ácidos, lo cual podría explicar el porqué del incremento en los %R con la disminución del pH.

La remoción de los colorantes con biochar obtenido de la cáscara de banano, es una alternativa muy efectiva y factible. Además, nace de la necesidad de buscar adsorbentes naturales renovables, de fácil disponibilidad, de bajo costo y que restaure los ecosistemas afectados, en busca del bienestar humano.

BIO-NANOCOMPOSITOS Y SUS POTENCIALES APLICACIONES EN LA REMOCIÓN DE CONTAMINANTES ORGÁNICOS

Mariel Godoy P a*, Carolina Espinosa a, Diego Oyarzún b, Guadalupe del C. Pizarro c, Julio Sánchez a.

a Departamento de Ciencias del Ambiente, Facultad de Química y Biología, Universidad de Santiago, Chile.
b Center of Applied Nanosciences (CANS), Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Andrés Bello, Santiago, Chile.
c Departamento de Química, Universidad Tecnológica Metropolitana, Santiago, Chile.
*Autor de correspondencia: mariel.godoy@usach.cl

Palabras Claves: Hidrogeles; nanocelulosa fibrilada; propiedades mecánicas, nanocompositos.

Los hidrogeles son polímeros hidrofílicos entrecruzados y han sido ampliamente estudiados en diferentes campos tales como aplicaciones biomédicas, así también en procesos de tratamiento de aguas [1]. Para poder utilizarlos, los hidrogeles necesitan tener propiedades físicas y químicas adecuadas. Una manera de modificar las características finales del hidrogel es la funcionalización química o la formación de compositos mezclándolos con diversos materiales (arcillas, nanopartículas metálicas, nanocelulosa, entre otras) de manera de generar un nuevo material con propiedades mejoradas [2]. En el presente trabajo se sintetizaron una serie de hidrogeles basados en monómeros vinílicos con grupos funcionales de amonios cuaternarios (PCIAETA). Con el fin de mejorar las propiedades mecánicas del hidrogel, se preparó también en presencia de diferentes porcentajes en masa de nanocelulosa fibrilada (NFC) obtenida de acuerdo a la literatura [2]. Los bio-nanocompositos fueron caracterizados por SEM, TGA y FTIR. Además, se realizaron estudios de porcentaje de hidratación y de remoción de colorantes orgánicos con este material.

Los resultados muestran una adecuada incorporación de la NFC en el hidrogel generando un material de aspecto homogéneo, lo cual también se ve corroborado por SEM. La caracterización por FTIR muestra señales de los grupos funcionales del polímero PCLAETA. El estudio hidratación evidencia diferencias entre el hidrogel e hidrogel/NFC, observando mayor grado de hidratación en el hidrogel puro Finalmente, este nuevo material mostró eficiencia en la remoción de anaranjado de metilo desde solución acuosa, lo cual lo hace un material prometedor para eliminación de contaminantes orgánicos.

Agradecimientos: Proyecto Fondecyt Regular (Nº 1191336).

- [1]. Dax D., Sánchez J. et al. (2014). Carbohyd. Polym. 111, 797–805.
- [2]. Dax D., Sánchez J. Et al. (2015). Nordic Pulp & Paper Research Journal, 30, 373-384. 3.



OBTENCIÓN DE UN ADSORBENTE PARA LA RETENCIÓN DE ORO PREPARADO A PARTIR DE RESIDUOS FORESTALES

Marlon M. Cuetocue ^a, Rodrigo A. Sarria-Villa ^{a*}, José A. Gallo ^b, Ricardo Benítez ^b.

^aGrupo de Investigación en Química Analítica Ambiental (GIQA), Departamento de Química, Universidad del Cauca, Colombia

^b Química de productos naturales (QPN), Departamento de Química, Universidad del Cauca, Colombia

**Autor de correspondencia: rodrigosv@unicauca.edu.co

Palabras Claves: Adsorción; oro; corteza; taninos.

Hoy en día, el oro se utiliza ampliamente para dispositivos eléctricos y electrónicos debido a su alta estabilidad química y alta conductividad, en consecuencia, su consumo ha aumentado exponencialmente. Durante la explotación minera se generan residuos de oro, lo que produce una cantidad considerable de aguas residuales y sedimentos que contienen oro, generando impactos negativos en el medio ambiente. El oro presente en los sedimentos se puede extraer eficazmente en soluciones ácidas, proporcionando un recurso importante de recuperación de oro. Es fundamental encontrar un método efectivo para la recuperación de oro a la vista de la protección del medio ambiente y la plena utilización de los recursos naturales para la extracción de oro. Se han empleado técnicas para la recuperación de oro; (I) adsorción por resina de intercambio iónico (II) extracción por solvente y (III) precipitado de oro reducido por reactivos. Sin embargo, estos procesos de recuperación actuales requieren mucho trabajo y tiempo a un alto costo. En este sentido, se propuso en este trabajo, generar un adsorbente de origen tánico obtenido a partir de residuos forestales donde se emplea la corteza de pino, como una clara alternativa para la recuperación de oro presente en los sedimentos residuales. Una vez extraídos los taninos presentes en la corteza de pino, se mezclan con el agente reticulante en un matraz de fondo redondo de tres bocas de 200 ml y se agita a ebullición. Las pruebas de adsorción para oro se realizan en las siguientes etapas: se toman 10 mL de soluciones de concentración conocida de oro y se mezclan con 10 mg de adsorbente seco, las muestras se agitan hasta alcanzar el equilibrio. Después de la adsorción, las muestras se filtran inmediatamente y se mide cuantitativamente usando espectroscopia de absorción por llama. El adsorbente preparado fue efectivo para la adsorción de oro en soluciones de concentración conocida, mostrando porcentajes de adsorción entre 95-98%.

BIOREMEDACIÓN DE PROGESTERONA MEDIANTE LA BIOMASA RESIDUAL DE LA MICROALGA *CHLORELLA SP.*, DESPUÉS DE LA EXTRACCIÓN DE LÍPIDOS

María E. Matar a*, Diana C. Prins a, Nestor J. Cubillan a, Victor A. Vacca a

^a Grupo de investigación en Biotecnología de Microalgas, Fisicoquímica Aplicada y Estudios Ambientales, Universidad del Atlántico, Colombia.

* Autor de correspondencia: ingmatar@hotmail.com

Palabras Claves: Hormona esteroidal; microalga; remoción; espectrometría UV-VIS.

La bioacumulación y la falta de regulación legal de las hormonas esteroidales en aguas residuales generan un grave problema ambiental mundial con respecto al consumo de agua potable. Las hormonas esteroidales naturales y sintéticas en el medio ambiente acuático, pueden causar efectos adversos en organismos acuáticos, animales y seres humanos.

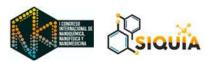
En este trabajo se planteó un estudio experimental de la remoción de la progesterona mediante la biomasa no viva y residual de la microalga *Chlorella sp.*, obtenida después de la extracción de lípidos. Se determinó la capacidad adsortiva de la microalga, estableciendo las condiciones óptimas de pH, cantidad del adsorbente y concentración del contaminante.

Se realizó el cultivo de la microalga *Chlorella* sp, a partir de un fertilizante comercial y se inoculó con una concentración equivalente a 0.1 de absorbancia de microalga. Con el objetivo de obtener la microalga muerta. A partir de la microalga muerta se obtiene los lípidos y la biomasa residual de la microalga que posteriormente se usó para la remoción.

Se determinó que el rango óptimo de la progesterona es de 10 a 100 ppm por medio de la técnica de espectrometría UV-VIS. El porcentaje de remoción de la progesterona por medio de la biomasa residual fue de 43,5 %, y la condición óptima fue de pH 5, concentración de progesterona de 60 ppm y 50 mg de biomasa residual. El ensayo de cinética determinó la remoción en 3 horas.

Para la biomasa no viva, el porcentaje de remoción fue de 47,2% y la condición óptima para este diseño experimental fue de pH 4, concentración de progesterona 40 ppm y 50 mg de la biomasa no viva. La cinética determinó la remoción en 3 horas.

En conclusión, la biomasa no viva de la microalga presentó un mayor porcentaje de remoción de progesterona con respecto a la biomasa residual de microalga. Además, se concluye que la progesterona presenta mayores porcentajes de remoción a pH ácidos, en concentraciones entre 40 y 60 ppm de progesterona.



PROYECTO MERCURIO CERO: REMOCIÓN DE MERCURIO MEDIANTE ELECTROCOAGULACIÓN, EN MUESTRAS DE AGUA DEL RÍO ARZOBISPO CUENCA MEDIA

Luis Eduardo Peña Prieto ^a, Adriana Marcela Alméciga Gómez ^b, Xiomara Jiménez ^c, Rafael Meza Benitez ^c, Johanna Bonilla ^d.

^a Instrumentación Química, Universidad Distrital FJC, Colombia.

^b Química aplicada a la sostenibilidad (QAS), semillero de investigación PRISMA, Universidad ECCI, Colombia.

^c Análisis Bio Estadística lógica (ABEL), semillero de investigación PRISMA, Universidad ECCI, Colombia.

^d Estudiante de Ingeniería ambiental, semillero de investigación PRISMA, Universidad ECCI, Colombia.

*Autor de correspondencia: NEZHNAIA@hotmail.com, aalmècigag@ecci.edu.co, xjimenezm@ecci.edu.co, rmezab@ecci.edu.co

Palabras Claves: Electrocoagulación; mercurio; agua potable; coagulación; floculación.

La electrocoagulación es una tecnología antigua pero emergente. Su eficacia se ubica por encima del 99,99%, es económica, no requiere obras civiles. Permite remover hasta parámetros propios del agua potable, los contaminantes presentes en el agua cruda.

En la presente investigación se logró remover mercurio desde 0,002 ppm hasta un valor no detectable. Las mediciones de los parámetros del metal pesado se realizaron con el equipo de absorción atómica marca MILESTONE, modelo DMA-80, serial 10050870, del laboratorio COLCAN, calle 49 # 13-60-BOGOTÀ D.C. El valor obligatorio de mercurio para agua potable exigido por las entidades de control a nivel internacional, EPA, OMS, CEE; es de 0,001 ppm. También en COLOMBIA este es el parámetro exigido por la resolución 2115 del 22 de junio del año 2007, ministerios de la protección social y del medio ambiente.

El proceso de electrocoagulación se aplicó a una muestra de agua procedente del Río arzobispo, cuenca media, utilizando una celda electroquímica con capacidad de 8 litros. Su configuración cuenta con electrodos de aluminio y de hierro. La intensidad eléctrica fue de 20 amperios y una diferencia de potencial de 24 voltios.

El resultado alcanzado muestra una relación directa entre la eficacia de la electrocoagulación con la remoción de metales pesados.

DEGRADACIÓN DEL COLORANTE ROJO PONCEAU MEDIANTE CWHPO EMPLEANDO ARCILLAS PILARIZADAS CON AL-FE

Paula A. Henao a, Iván F. Macías a, Nancy R. Sanabria a*.

^a Procesos Químicos, Catalíticos y Biotecnológicos, Universidad Nacional de Colombia – Sede Manizales, Colombia * Autor de correspondencia: nrsanabriag@unal.edu.co

Palabras Claves: Al-Fe PILC; advanced process oxidation (PAOs); fenton like; azo dyes; ponceau red.

La mayoría de procesos industriales relacionados con la industria textil y de alimentos involucra el uso de colorantes sintéticos, los cuales en su mayoría (60-70%) son de tipo azoico (-N=N-). Entre los colorantes más empleados se encuentra el rojo Ponceau 4R (E-124), aditivo en cerezas en conserva, jugos, gaseosas, leches saborizadas, yogures, batidos, helados, jaleas, gelatinas y dulces (caramelos blandos, duros, gomas, cubiertas de pastelería), entre otros. Debido a su estructura compleja ($C_{20}H_{11}N_2Na_3O_{10}S_3$), este colorante es muy estable en medio acuoso (vida media de 133 días expuesto a la luz solar) y su vertimiento constituye un riesgo para el medio ambiente.

Se plantea evaluar el potencial catalítico de una bentonita pilarizada con Al-Fe con 2, 6 y 10 % molar de Fe, para la oxidación y decoloración del rojo Ponceau 4R mediante oxidación catalítica por vía húmeda (CWHPO). Se evaluó el efecto de la dosis de peróxido de hidrogeno entre 1 y 6 veces la dosis teórica requerida para la oxidación completa del colorante, teniendo como variables respuesta el % de decoloración y conversión de carbono orgánico total (COT).

La mayor remoción de color alcanzada fue del 38.6% para el material sintetizado con la menor cantidad de Fe incorporado. Se encontró que el incremento en la dosis de H_2O_2 no favoreció el proceso de decoloración. En cuanto al proceso de mineralización del colorante, un exceso de peróxido de hidrógeno contribuyó al aumento de la conversión de COT; sin embargo, los resultados obtenidos durante los ensayos muestran bajo grado de mineralización, no exceden del 18%. Estos resultados se asocian con el área superficial polar que tiene el rojo Ponceau (238 Ų), lo que puede generar limitaciones en la interacción del colorante con el material poroso.



EFECTO DE LA EXPOSICIÓN A METALES PESADOS (CADMIO) EN LA RESPUESTA METABÓLICA DE LAS HOJAS, TALLOS Y RAÍCES DE LUPINUS BOGOTENSIS

María A. Roa P. a*, Camilo Serrato M. a, Luisa M. Garzón M. a, Martha C. Rozo L. b, E. D. Coy Barrera b.

a Estudiante Ingeniería Ambiental, Facultad de Ingeniería, Universidad Militar Nueva Granada, Colombia
b Docente Grupo de Investigaciones en Química y Biología, Departamento de Química,
Universidad Militar Nueva Granada, Colombia.

* Autor de correspondencia: u5400258@unimilitar.edu.co

Palabras Claves: Cadmio; lupinus; restauración; metabolismo.

Al género Lupinus (Fabaceae) pertenecen especies que han sido utilizadas como posibles fitoremediadores del suelo tanto de contaminantes orgánicos (diésel, gasolina, etc) como de metales pesados (Cd, Hg, Cr), estas especies, muchas de las cuales son endémicas de la zona de sabana norte, son capaces de inmovilizar los iones y/o los contaminantes orgánicos, con una baja o nula afectación de su desarrollo. El río Bogotá juega un papel estratégico en la sabana del Centro del país, tomada como zona de influencia, debido a que a lo largo de todos los tramos del río se presenta contaminación por metales pesados generado por varias industrias contaminantes en donde los vertimientos generan diferentes concentraciones de metales pesados como el cadmio, mercurio, plomo y arsénico debido a la incidencia que puede tener sobre las plantas sometidas a estos regímenes, el presente estudio se planteó evaluar la presencia de cadmio considerado como un metal pesado, efectuado sobre la germinación y el metabolismo secundario de la especie Lupinus bogotensis para lo cual se usó semillas de dicha especie que fueron sembradas y fertilizadas utilizando como solución nutritiva una solución de Hoagland suplementada con sulfato de cadmio en diferentes concentraciones, incluyendo una solución control. Se comparó el desarrollo de hojas, tallos y raíces de la planta en términos de la biomasa producida, en muestras colectadas en un tiempo aproximadamente de tres meses posterior a la germinación. Las muestras de hojas, tallos y raíces obtenidas fueron maceradas con nitrógeno líquido y sometidas a extracción con etanol absoluto, los extractos resultantes se filtraron y fueron sometidos a un análisis por HPLC-MS. Para determinar las relaciones existentes entre las muestras se utilizaron herramientas de estadística multivariada con el programa "MetaboAnalyst"

CARACTERIZACIÓN MICROQUÍMICA DE LAS FASES INORGÁNICAS ENCONTRADAS EN CARBONES VEGETALES OBTENIDOS A PARTIR DE LA PIROLISIS DE RESIDUOS DE PODA Y JARDINERÍA

Henry Brian Pedraza-Martínez a, Walter Pardavé-Livia a, Pedro Delvasto a*.

^a Escuela de Ingeniería Metalúrgica y Ciencia de Materiales, Universidad Industrial de Santander, Colombia. * Autor de correspondencia: <u>delvasto@uis.edu.co</u>

Palabras Claves: Residuos; pirólisis; carbón vegetal; biocarbón; fertilizantes.

Actualmente, se reconoce que la pirólisis constituyen una manera efectiva para procesar residuos orgánicos, particularmente aquellos provenientes del sector agroindustrial o del manejo de bosques y jardines. Dichos procesos permiten recuperar gases con poder calorífico aprovechable y carbones vegetales, los cuales son sólidos carbonosos cuyos usos no sólo incluyen la generación de energía térmica, sino también su aplicación directa como enmienda en suelos degradados, ya que el carbón vegetal, también llamado biocarbón, puede aportar al suelo carbono, nitrógeno y otros nutrientes. Para esta segunda aplicación, resulta de suma importancia la caracterización de las fases inorgánicas que permanecen ocluidas dentro del material carbonoso luego de la pirolisis, ya que las mismas influirán sobre la actividad fertilizante que pueda tener el carbón vegetal, una vez se incorpore al suelo degradado. La microscopía electrónica de barrido (SEM), acoplada con microanálisis químico por espectroscopía de rayos x de energías dispersivas (EDS), constituye una herramienta efectiva para caracterizar microquímica y morfológicamente las partículas minerales que quedan dentro del biocarbón. Teniendo en cuenta esta realidad, en el presente trabajo se pirolizaron entre 800 °C y 1200 °C muestras de residuos de jardinería y de poda de árboles, recolectados en la ciudad de Bucaramanga. Se estudiaron seis muestras en total, dos de ellas provinieron de residuos de hojarasca y gramíneas, dos de residuos de poda de setos y tres provenientes de poda de árboles ornamentales. Los carbones obtenidos se caracterizaron mediante análisis próximo y análisis elemental, determinándose que presentaron contenidos (% en peso) de cenizas entre 2 % y 27 %, contenidos de carbono total entre 55 % y 86 % y de nitrógeno entre 0,4 % y 1,1 %. En cuanto a los análisis SEM-EDS de las partículas minerales presentes en los carbones, se identificaron partículas con contenidos variables de fósforo, potasio, azufre, sodio, calcio, cloro, titanio, hierro y zinc. Finalmente, se discuten los impactos que estos hallazgos pudieran tener sobre la aplicación de estos carbones como enmiendas a suelos sometidos a degradación antropogénica.



CARACTERIZACIÓN DE LAS FASES ESCORIA Y METAL QUE SE FORMAN AL PONER EN CONTACTO ALUMINIO LÍQUIDO CON LOS ÁNODOS RICOS EN ZINC EXTRAÍDOS DE BATERÍAS ALCALINAS DESECHADAS

Jhon Caballero-Jaimes a, Katherinne Babativa a, Pedro Delvasto a*.

^a Escuela de Ingeniería Metalúrgica y Ciencia de Materiales, Universidad Industrial de Santander, Colombia. * Autor de correspondencia: <u>delvasto@uis.edu.co</u>

Palabras Claves: Reciclaje de baterías; fundición; aleaciones de aluminio, zinc.

Entre las diversas opciones locales para el reaprovechamiento de los metales contenidos en baterías alcalinas desechadas, la industria de fundición de aluminio parece ofrecer cierta ventaja, en virtud de que el aluminio es un metal termodinámicamente activo, el cual puede usarse como agente reductor para los óxidos presentes en los materiales de los electrodos de las baterías gastadas. Teniendo en cuenta la situación mencionada, en este trabajo se estudió la incorporación directa en aluminio líquido de los ánodos ricos en zinc de las baterías alcalinas gastadas, con el objetivo de obtener aleaciones de aluminio con zinc. En el proceso se evaluó el efecto de agentes modificantes de la fase escoria que se genera durante la fusión. Los cambios químicos de la aleación producida se monitorearon mediante espectroscopía de emisión óptica y microscopía electrónica de barrido acoplada con microanálisis químico por espectroscopía de energía dispersiva de rayos x. Por otro lado, las escorias generadas bajo las diferentes condiciones estudiadas se caracterizaron mediante difracción de rayos x, con el fin de determinar diferencias debidas al proceso de reducción de los óxidos de zinc presentes en las pilas alcalinas desechadas, cuando éstas entran en contacto con el aluminio fundido. Se encontró que cuando se emplea tetraborato de sodio durante el proceso de fusión, la incorporación de zinc en la aleación aumenta desde 0.01 % en peso hasta aproximadamente 1.5 % en peso y las escorias formadas muestran evidencias de reacción, debido a la presencia en éstas de zinc metálico y boratos de zinc. Estos resultados muestran que la incorporación directa de las fracciones que contienen Zn de las baterías alcalinas gastadas en el aluminio fundido es factible para producir aleaciones de Al-Zn cuando se emplean agentes modificantes de la fase escoria. Finalmente, se discuten las implicaciones de estos resultados de cara al procesamiento a pequeña escala de baterías alcalinas gastadas.

FABRICACIÓN DE PIGMENTOS INORGÁNICOS BASADOS EN ÓXIDOS DE NÍQUEL Y COBALTO RECUPERADOS A PARTIR DE BATERÍAS DOMÉSTICAS GASTADAS Y SU APLICACIÓN EN ESMALTES CERÁMICOS

Claudia Y. Vargas-Angarita a, Milton Julián Ballén-Fiallo a, Pedro Delvasto a*.

^a Escuela de Ingeniería Metalúrgica y Ciencia de Materiales, Universidad Industrial de Santander, Colombia. * Autor de correspondencia: <u>delvasto@uis.edu.co</u>

Palabras Claves: Reciclaje de baterías; óxido de níquel; óxido de cobalto; esmaltes cerámicos; pigmentos inorgánicos.

El auge de los aparatos electrónicos portátiles conlleva un incremento en el uso de baterías recargables de los tipos níquel hidruro metálico (Ni-MH) e iones de litio (Li-Ion). Al acabar su vida útil, las baterías pueden causar contaminación si no se reciclan. Debido a su composición química, rica en óxidos metálicos, las baterías podrían reaprovecharse como materias primas en la industria cerámica, bajo la forma de pigmentos inorgánicos en esmaltes vítreos. En el presente trabajo se recolectó, en los contenedores de residuos electrónicos del sistema de gestión integrado de la Universidad Industrial de Santander, una muestra de 4 kg de pilas Ni-MH y Li-Ion. Éstas se descargaron y desensamblaron empleando herramientas manuales, para obtener los polvos electródicos contenidos en las mismas. En el caso de las baterías Ni-MH, se extrajo una mezcla rica en níquel proveniente de los polvos del cátodo y del ánodo, mientras que en el caso de las Li-Ion solamente se extrajo el cátodo de la pila, rico en cobalto. Ambos polvos se mezclaron, por separado, con vidrio soda-lime transparente (envases de bebidas) y fundentes (tetraborato de litio y de sodio). Todas las mezclas producidas contenían 10 % másico de polvo electródico. La fusión de las materias primas se llevó a cabo a 1080 °C en un horno mufla por 1 hora y la colada se realizó sobre agua, para formar una frita que luego se pulverizó hasta 100 % < 150 micrómetros. Los vidrios (fritas) obtenidos se caracterizaron mediante fluorescencia de rayos X, espectroscopía infrarroja por trasformada de Fourier y microscopía electrónica de barrido. Finalmente, las fritas se incorporaron en suspensiones de caolín blanco y se emplearon para formar esmaltes cerámicos de color azul (0,7 % cobalto) y color verde oscuro (0,5 % níquel).



FORMULACIÓN DE UN PLAN PARA EL MANEJO Y DISPOSICIÓN DE RESIDUOS DE ASBESTO EN LA INSTITUCIÓN EDUCATIVA RURAL VIJAGUAL

María L. Lamus a, Sandra D. Bautista a*, Angélica Ma. Candela b, Ruth Marcela Díaz c.

^a Maestría en ciencias y tecnologías ambientales

^b Grupo de Investigación en Nuevos Materiales y Energía Alternativas, GINMEA, Facultad de Química Ambiental. ^c Grupo de Investigación de Arquitectura GINVEARQUI, Facultad de Arquitectura. División de Ingenierías y Arquitectura. Universidad Santo Tomás.

* Autor de correspondencia: sadebasi@gmail.com; ruth.diaz@ustabuca.edu.co

Palabras Claves: Asbesto; comunidad educativa; riesgo; plan de manejo y disposición de residuos.

La Institución Educativa Rural Vijagual ubicada en el municipio de Bucaramanga y sus sedes, actualmente, presentan una problemática por el exceso de material residual de anteriores edificaciones que tienen contenido de asbesto, el cual no ha sido objeto de una adecuada disposición final, estando expuesto al aire libre, generando un problema ambiental (invisible). El desconocimiento de la comunidad y libre uso del asbesto como insumo para procesos industriales, se han conjugado, para que este material represente un peligro inminente para la salud pública de las personas que involuntariamente "consumen" este complejo químico por vía dérmica y/u oral y/o respiratoria, frente a lo cual, actualmente no existe una ley que la prohíba.,

En este contexto, el trabajo propone una alternativa de solución para controlar este factor de riesgo de exposición en la salud y el ambiente, el cual consiste en la elaboración de un Plan de manejo para la disposición de Materiales que contienen asbesto en la institución educativa. La metodología implementada obedece a una secuencia de etapas, descrito en Arboleda [1]: 1. Definición de competencias al interior de la Institución y determinación de estrategias, 2. Diagnóstico de la situación, 3. Calificación ambiental del impacto, 4. Establecimiento de prioridades, 5. La formulación y evaluación de alternativas. El estudio concluye que se identificaron impactos ambientales encontrándose que el principal es la Generación de residuos peligrosos (asbesto) de modo que, si no se realiza una recolección y separación en la fuente adecuada repercutirá directamente sobre componentes como el suelo, generando afectaciones de composición, compactación y propiedades físicas del mismo, que pueden repercutir directamente sobre la salud de todos los actores de la comunidad educativa.

[1]. Arboleda, J. (2008). Manual de evaluación de impacto ambiental de proyectos, obras o actividades. Manual de Evaluación de Impacto Ambiental de Proyectos, Obras o Actividades.

EVALUACIÓN PRELIMINAR DE MATERIALES NO CONVENCIONALES PARA EL TRATAMIENTO PASIVO DE DRENAJES ÁCIDOS DE MINERÍA Y SU APLICACIÓN EN UNA CELDA BIOGEOQUÍMICA A ESCALA DE LABORATORIO

Daniela Torres-Arboleda a, Pedro Delvasto a*.

^a Escuela de Ingeniería Metalúrgica y Ciencia de Materiales, Universidad Industrial de Santander, Colombia *Autor de correspondencia: delvasto@uis.edu.co

Palabras Claves: Drenajes ácidos de minas; metales pesados; neutralización.

El drenaje ácido de minas es uno de los mayores problemas ambientales generados por las industrias mineras. El mismo ocurre como resultado de la oxidación de los minerales de sulfuro expuestos por la minería a la atmósfera, lo que conlleva a la formación de efluentes acuosos con elevada acidez, alta concentración de metales pesados y grandes cargas de sulfato. Un mecanismo posible de tratamiento de estos efluentes se conoce como "tratamiento pasivo", como los humedales artificiales, los cuales representan una alternativa sostenible, que se utiliza principalmente como complemento eficaz para la remoción de metales pesados y elevación del pH.

En el presente trabajo se evaluó el poder neutralizante de diferentes materiales geológicos, naturales y antropogénicos, mediante pruebas de frasco agitado, la selección de estos materiales permitió la confección y montaje de una celda biogeoquímica a escala de laboratorio que busca actuar como barrera reactiva y química a los efluentes ácidos. La cal apagada y el cemento portland resultaron los materiales con mayor capacidad de neutralización, por lo cual fueron empleados para la constitución de un filtro de alcalinidad en una de las zonas de la celda, las otras zonas estaban constituidas por grava de río, carbón vegetal, mineral de hierro, arena de sílice y biomasa. Esta celda fue irrigada con agua ácida sintética con altas concentraciones de hierro y otros metales pesados y un pH menor a ~ 2,5 con un caudal de 0,2 L/s durante dos meses. El monitoreo se llevó a cabo mediante la toma de pH y el contenido de metales a través de absorción atómica en cada una de las zonas que constituían la celda, luego se realizó el desmontaje y análisis post tratamiento de los materiales a través de microscopía electrónica de barrido (SEM) y DRX, para determinar minerales secundarios adheridos a ellos, dada la posible precipitación de los metales durante el tratamiento La celda mostró un aumento del pH durante un tiempo hasta que su capacidad neutralizante comenzó a disminuir, debido a la presencia de minerales secundarios adheridos en los diferentes materiales seleccionados de acuerdo con los análisis de SEM y DRX.



DESARROLLO DE UN DISEÑO EXPERIMENTAL 23 PARA EVALUAR RENDIMIENTOS DE PRETRATAMIENTOS OXIDATIVOS SOBRE BIO-MASAS LIGNOCELULÓSICAS

Daniel Y. Ardila a*, Olga L. Bayona a.

a. Grupo de Investigación en nuevos materiales y energías Alternativas GINMEA, Universidad Santo Tomas, Colombia.
*Autor de correspondencia: daniel.ardila@ustabuca.edu.co

Palabras Claves: Biomasa; pretratamiento; bioetanol; peróxido de hidrogeno.

Preocupaciones ambientales y la futura limitación de las reservas de los combustibles fósiles tiene centrada la atención del mundo actual. Con esto, surge la necesidad de investigar en la búsqueda de fuentes renovables de energía y tecnologías de producción de biocombustibles que consigan disminuir los problemas relacionados con el uso de combustibles fósiles. La producción de biocombustibles. Las biomasas azucaradas y almidonadas presentan una gran facilidad para ser procesadas en la obtención de bioetanol, sin embargo, el uso de cultivos alimenticios para la producción de biocombustible genera gran polémica debido a las crisis alimentarias que puedan ocurrir. Por otro lado, la biomasa lignocelulósica, como los residuos agrícolas y forestales, presentan una gran aplicación como una fuente prometedora de biocombustible, ya que este tipo de biomasa en específico no interfiere con la fuente alimenticia de los seres humanos.

Los polisacáridos presentes en la biomasa lignocelulósica deben ser convertidos en azucares simples, básicamente monómeros que posteriormente puedan ser fermentados en etanol. Sin embargo, la celulosa se encuentra protegida por un complejo de lignina y hemicelulosa lo cual dificulta la acción de las enzimas sobre la celulosa en el momento de la hidrólisis. Razón por la cual es necesario realizar un tratamiento previo del material lignocelulósico que permita remover o desestructurar las fracciones de lignina y hemicelulosa para que las fibras de celulosa sean más accesibles y abundantes en el material cuando sea sometido a la etapa de hidrólisis enzimática. El objetivo del pretratamiento con peróxido de hidrógeno es alterar la estructura de la biomasa lignocelulósica dando lugar al aumento del área superficial y porosidad del material, modificar y remover la lignina y parcialmente la hemicelulosa, así como reducir la cristalinidad de la celulosa. Los resultados de microscopia electrónica de barrido confirmaron los cambios en la morfología de la biomasa y los análisis por DRX confirmaron la disminución del índice de cristalinidad.

OBTENCIÓN DE FÓSFORO ASIMILABLE A PARTIR DE ROCA FOSFÓRICA USANDO ÁCIDOS ORGÁNICOS DE BAJO PESO MOLECULAR PARA EL APROVECHAMIENTO EN FERTILIZANTES

Sergio M. Betancur ^{a*}, Martha L. Acevedo ^a, Carlos A. Peláez ^a.

a Grupo Interdisciplinario de Estudios Moleculares - GIEM, Universidad de Antioquia, Colombia.

* Autor de correspondencia: smauricio.betancur@udea.edu.co

Palabras Claves: Fósforo; plantas; suelo; fósforo asimilable; roca fosfórica; ácido cítrico; ácido oxálico.

El fósforo (P) es un macronutriente esencial para un gran número de biosistemas. Este elemento se encuentra dentro del esqueleto de moléculas que son de suma importancia para el buen funcionamiento fisiológico de los seres vivos, por ejemplo, en las moléculas de ATP, ADN y Fosfolípidos. Esta investigación se centrará en el rol que cumple el P en las plantas, siendo este elemento de gran relevancia durante el crecimiento y desarrollo de éstas.

Sin embargo, al momento de estudiar la disponibilidad de éste macronutriente en los suelos de Colombia se encuentra que es limitada y no es debido a su baja concentración en esta matriz, sino a las múltiples reacciones que sufre el P con los iones metálicos y coloides presentes en el suelo formando sustancias insolubles y considerablemente estables que evitan que las plantas posean una fuente disponible de P asimilable (P_A) . Es por ello que el objetivo general de esta investigación es obtener P_A a partir de un mineral rico en este elemento como lo es la Roca Fosfórica (RF), cuyo contenido en P es alto y poco disponible; y a partir del producto obtenido formular fertilizantes ricos en P y ambientalmente amigables que permitan mejorar la producción agrícola colombiana.

Teniendo en cuenta lo anterior, se decide tratar la RF con diferentes proporciones de Ácidos Orgánicos de Bajo Peso Molecular, principalmente con Ácido Cítrico (AC) y Ácido Oxálico (AO) formando mezclas entre ambas sustancias. Las mezclas obtenidas se someten a calentamiento a diferentes temperaturas y a diferentes días, esto con el fin de optimizar la temperatura de extracción más eficiente e identificar la cinética de cada reacción. Al final del proceso se logra identificar que las extracciones realizadas con AO a 60 °C y en un periodo de 10 días son las más eficientes ya que el porcentaje obtenido de P_A es del 88,8% en comparación al 23,7% obtenido al tratar la RF con AC en las mismas condiciones de temperatura y tiempo.

En forma conclusión se puede afirmar que el tratamiento con AO es un método prometedor para obtener P_{A} de forma económica y verde.



DESARROLLO DE SENSORES BASADOS EN REDES ORGÁNICAS COVALENTES Y REDES METAL-ORGÁNICAS PARA LA DETECCIÓN DE AMONIACO Y DE AMINAS DE BAJO PESO MOLECULAR

Andrés Rodríguez C. a, Elio A. Rico a, César Augusto Sierra Ávila a, Oscar Rodríguez Bejarano b*.

^a Grupo de Macromoléculas, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá

^b Grupo de Electroquímica y Termodinámica Computacional, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá.
* Autor de correspondencia: orodriguez@unal.edu.co

Palabras Claves: Sensores; EIS; COF; MOF.

Este trabajo presenta el desarrollo de quimiosensores resistivos, basados en redes orgánicas covalentes (COF, por sus siglas en ingles) y en redes metal-orgánicas (MOF), para detectar amoniaco y aminas de bajo peso molecular. Estos materiales se depositaron sobre electrodos interdigitados de oro (IDE) y su comportamiento frente a las substancias mencionadas se caracterizó mediante espectroscopía de impedancia electroquímica (EIS).

De los múltiples compuestos sintetizados, dos COF (TFP-BZ y TFP-DMBZ) y un MOF (*fcu*-NDC-Y) presentaron respuesta a la presencia y a los cambios en la concentración de amoniaco y/o aminas orgánicas de bajo peso molecular, en mezclas con nitrógeno gaseoso. Los cambios de impedancia de las películas de MOF y COF depositadas sobre los IDE se evaluaron a una frecuencia de 10Hz, seleccionada luego de la caracterización completa de los espectros de EIS. La relación entre la señal de respuesta y la concentración de compuestos sensados es lineal solo en el rango de bajas concentraciones, más específicamente a valores por debajo de las 10ppm.

Mostraré en esta presentación las diferentes estrategias seguidas para el desarrollo de los sensores y por qué nos decidimos finalmente por las mediciones de impedancia a una sola frecuencia, como herramienta para detectar y/o cuantificar amoniaco y aminas de bajo peso molecular en fase gaseosa.

ALTERNATIVA DE BIORREMEDIACIÓN A PARTIR DE RESIDUOS DE CACAO EN LA OBTENCIÓN DE HONGOS *PLEUROTUS OSTREATUS*CON LA IMPLEMENTACIÓN DE UN ANÁLISIS MULTICRITERIO

Juan E. Ortiz^a, Yisel Mejía^a, David E. González^a, Luz S. García-Alzate^{b*}, Ximena Cifuentes-Wchima^b.

^a Semillero de Biorremediación, Grupo de Investigación Gerencia de la Tierra, Universidad La Gran Colombia Armenia, Colombia.

^b Grupo de Investigación Gerencia de la Tierra, Universidad La Gran Colombia Armenia, Colombia.

*Autor de correspondencia: garciaalzluz@miugca.edu.co

Palabras Claves: Biorremediación; cultivo; multicriterio; reducción; residuos.

El cultivo de cacao *Theobroma cacao* L. en Colombia se ha venido desarrollado notablemente, donde el 2018 terminó con una producción de 56.000 toneladas, lo cual evidencia un crecimiento promedio de 6,48% en los últimos 10 años; sin embargo, este crecimiento desencadena consecuencias ambientales, debido a que solo el 10% del fruto es considerado útil para la industria agronómica, lo que puede generar problemáticas ambientales como la propagación de microorganismos patógenos e insectos. El objetivo de esta investigación fue aprovechar el residuo derivado de la producción de cacao en la obtención de hongos *Pleurotus ostreatus* como técnica de biorremediación con la implementación de un análisis multicriterio del cultivo. La cáscara fue suministrada por productores del departamento del Quindío (Finca Paraná), a la cual se le realizó la caracterización fisicoquímica, de los parámetros de pH, lignina y celulosa, entre otros. Posteriormente, se empleó el sustrato para la obtención de hongos con una siembra al 4,0%; además de esto, se realizó la evaluación del flujo de lixiviados del cultivo a través del análisis multicriterio con ponderaciones de variables físico-ambientales empleando el software ArcGis 10.5. La caracterización fisicoquímica de la cáscara reportó un pH de 5,47±0,004, un porcentaje de humedad del 84,345±0,002 y de lignina y celulosa del 45,227±0,184 y 30,700±0,753, respectivamente; en la obtención del hongo, se observó la aparición de los primordios a los 16 días y el hongo para cosechar a los 21 días, reduciendo el volumen de residuos en un 60%; en el análisis multicriterio, las ponderaciones arrojaron un flujo medio de lixiviados en el tercer trimestre del año 2018, lo que indica que los lixiviados fluyen gracias a la agua lluvia y por medio del drenaje hidrológico hacia los cuerpos de agua o cultivos cercanos. Para concluir, de acuerdo con los porcentajes obtenidos durante la caracterización y el crecimiento del hongo, es posible determinar que la cáscara de cacao funciona como sustrato para la obtención de hongos *Pleurotus ostreatus* y son una alternativa de biorremediación de uso agronómico de estos residuos; al igual que la información del análisis multicriterio permite una toma de decisiones oportunas sobre el cultivo.



EVALUACIÓN DE LA BIOMASA VEGETAL (CEREZA) DE CAFÉ COMO SUSTRATO PARA EL CULTIVO DE HONGOS *PLEUROTUS OSTREATUS*

David E. González a, Juan E. Ortiza, Yisel Mejía Luz S. García-Alzate *, Ximena Cifuentes-Wchima .

^a Semillero de Biorremediación, Grupo de Investigación Gerencia de la Tierra, Universidad La Gran Colombia Armenia, Colombia.

b Grupo de Investigación Gerencia de la Tierra, Universidad La Gran Colombia Armenia, Colombia.
*Autor de correspondencia: garciaalzluz@miugca.edu.co

Palabras Claves: Biomasa; café; caracterización; lixiviados; residuos.

Colombia es un país productor de café, donde la cereza es uno de los residuos que se genera después del procesamiento del grano, se estima que el 60% son residuos; esta materia orgánica al entrar en descomposición puede generar gases y lixiviados, además de atraer roedores e insectos; todos estos pueden ser dañino para la población, el ambiente y los cultivos aledaños. El objetivo de esta investigación fue evaluar la biomasa vegetal (cereza) de café como sustrato para el cultivo de hongos Pleourotus ostreatus, con el fin de reducir la mayor cantidad de estos residuos. La biomasa vegetal (cereza) de café fue suministrada por agricultores del departamento del Quindío, la cual se caracterizó fisicoquímicamente, donde se analizaron diferentes parámetros tales como pH, humedad, fibra, grasa, celulosa, lignina, cenizas, materia orgánica y nitrógeno; para luego ser empleada como sustrato en el cultivo del hongo, con una desinfección con CaCO, al 0,6% y una siembra al 4,0% de semilla; para finalmente establecer si se puede emplear como medida de reducción de residuos (cereza de café). La caracterización fisicoquímica de la biomasa reportó un pH del 6,693±0,041, un porcentaje de humedad del 82,875±0,209 y contenido de lignina y celulosa del 28,954±0,046 y 48,390±0,326, respectivamente y materia orgánica del 13,249±0,187; en el cultivo del hongo, se observó la aparición de los primordios a los 16 días y el hongo para cosechar a los 20 días, reduciendo el volumen de residuos en un 80%. Para concluir, de acuerdo con la caracterización fisicoquímica de la biomasa vegetal (cereza) de café, contaba con componentes adecuados para emplearla como sustrato para el cultivo de hongos *Pleorotus ostreatus*; siendo de suma importancia que estos residuos pueden ser utilizados para la generación de un nuevo producto y/o la disminución de este, lo que lograría un equilibrio entre el ambiente y los residuos que se generan, contribuyendo a la minimización del cambio climático.

SÍNTESIS DE NANOFIBRAS DE CELULOSA A PARTIR DE PLÁTANO Y SU APLICACIÓN EN LA REMOCIÓN DE COLORANTES

Andrés F. Cruz-Posada ^a, Cristian C. Villa ^a, Eduart A. Gutiérrez ^b, Leidy T. Sánchez ^{c*}.

^a Programa de Química. Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías. Universidad del Quindío.

Cra ¹⁵ Calle ¹² N. Armenia. Quindío. Colombia.

^b Escuela de Química. Universidad Industrial de Santander. Colombia.

^c Programa de Ingeniería de Alimentos. Facultad de Ciencias Agroindustriales. Universidad del Quindío.

Cra ¹⁵ Calle ¹² N. Armenia. Quindío. Colombia

*Autor de correspondencia: Itsanchez@uniquindio.edu.co

Palabras clave: Plátano FHIA-21; hidrólisis enzimática; xilanasa; nanofibras; celulosa; remoción de colorantes

La contaminación del agua causada por los efluentes industriales es un problema ambiental a nivel mundial, en donde se generan grandes cantidades de aguas residuales que contienen sustancias peligrosas, como lo son metales pesados y colorantes artificiales. La presencia de tintes en las fuentes hídricas, provenientes de la industria textil, plástica, papelera y curtiembre, han generado investigaciones enfocadas en la eliminación de estos tintes por medio materiales adsorbentes, especialmente los que se componen de polímeros naturales debido a sus propiedades estructurales. En este trabajo se plantea la obtención de nanofibras de celulosa a partir de pulpa de plátano mediante un método enzimático que reduzca la contaminación ambiental del proceso. Las NFC se aislaron a partir de la cascara de plátano FHIA-21 por hidrólisis enzimática utilizando como enzima xilanasa, confirmado las dimensiones nanométricas de estos materiales por medio de TEM. Las propiedades estructurales fueron estudiadas por FTIR, DSC y DRX. Los parámetros que afectan la adsorción del azul de metileno de una solución acuosa, como las relaciones NFC, la concentración de colorante inicial, el pH de la solución, el tiempo, la dosis de adsorbente y la temperatura de la solución se investigaron en un sistema. El análisis de TEM confirmó las dimensiones nanométricas de las NFC. Mientras que se observó una absorción efectiva del azul de metileno en las NFC.



ANÁLISIS FISICOQUÍMICO Y DE RESIDUOS DE NEONICOTINOIDES EN MIEL DE ABEJAS PRODUCIDA EN EL QUINDÍO, COLOMBIA

Miguel E. Cardona J. ^a, Alejandra González H. ^a, Alberto Sánchez L. ^a, Alejandro García R. ^a, Lina M. León G. ^{a*}. *a Laboratorio de Plaguicidas y Salud, Universidad del Quindio, Colombia**Autor de correspondencia: plaguicidasysalud@uniquindio.edu.co

Palabras Claves: HPLC-DAD; QuEChERS; miel de abejas.

El Quindío es el Departamento más pequeño de Colombia, con una extensión de escasos . Un alto porcentaje de sus ingresos económicos provienen del sector agroindustrial. Este sector requiere la sinergia que se logra con las abejas como polinizadores para maximizar las ganancias por alta productividad y calidad de las cosechas. Adicionalmente, estos pequeños insectos crean productos de colmena que tienen valor agregado *per se* (miel, propóleo, ceras, entre otros) y son el sustento de muchas familias. La miel es el producto de la colmena con mayor demanda en el mercado. Es ampliamente utilizada como materia prima en complementos alimenticios, productos farmacéuticos y procesos industriales; por tanto, acorde a su posible uso requiere cumplir algunas características fisicoquímicas básicas y un nivel de inocuidad respecto a residuos de plaguicidas.

Con el fin de corroborar que la miel producida en el Quindío posee la calidad adecuada para cualquier uso, se analizaron las características fisicoquímicas según la NTC-1273 (ver **Figuras 1** y **2**) y los residuos de plaguicidas neonicotinoides (acetamiprid, imidacloprid y tiametoxam), en muestras procedentes desde los diferentes municipios del Departamento.

En la preparación de muestra para el análisis de residuos de neonicotinoides se utilizó una modificación de la metodología QuEChERS de la AOAC 2007.1 En el análisis se utilizó un equipo HPLC-DAD. La fase móvil fue ACN-H₂O en flujo isocrático.



Figura 1. Colores de las mieles del Quindío.

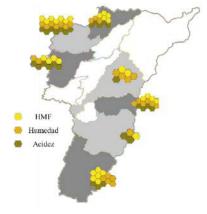


Figura 2. Características fisicoquímicas de las mieles del Quindío.

ANÁLISIS DE RESIDUOS DE FIPRONIL, CLORPIRIFOS Y ORGANO-CLORADOS EN MIEL DE ABEJAS (*APIS MELLIFERA*) PRODUCIDA EN EL OUINDÍO, COLOMBIA

Einy N. Bedoya A. ^a, Juliana García P. ^a, Alberto Sánchez L. ^a, Alejandro García R. ^a, Lina M. León G. ^{e*} *a Laboratorio de Plaguicidas y Salud, Universidad del Quindio, Colombia.**Autor de correspondencia: plaguicidasysalud@uniquindio.edu.co

Palabras Claves: GC-µECD; QuEChERS; Apis mellifera; Miel; hidroximetilfurfural

El Quindío, un departamento en el que habitan más de 100 especies de abejas, es considerado pieza clave como despensa agrícola de Colombia, debido a que destina a la agricultura más del 40% de su superficie. Pero, el ataque de plagas a los cultivos obliga al uso de agroquímicos cuyos principios activos podrían causar efectos secundarios, tales como, envenenamiento de la *Apis mellifera*, de la miel y de los demás productos de colmena. Por ese posible daño colateral, se planteó el desarrollo de este trabajo para verificar que la miel producida en el Quindío no contenga fipronil, clorpirifos y organoclorados, y además cumpla con los parámetros fisicoquímicos establecidos por la NTC-1273 (**Tabla** 1). En el análisis de residuos de plaguicidas se utilizó el método preparación de muestra QuEChERS modificado según la norma AOAC 2007.1 combinado con GC-mECD (**Figuras 1** y 2).

Tabla 1. Algunos parámetros fisicoquímicos evaluados en mieles procedentes desde los diferentes municipios del Quindío.

Parámetro	Rango	Unidades	Observación
Humedad	16 - 21	%	Valores considerados normales según la NTC-1273.
HMF	1,2 – 35,0	mg HMF kg miel	
Color	39 - 150	mm Pfund	Catalogadas desde miel ámbar extra claro hasta miel oscura.

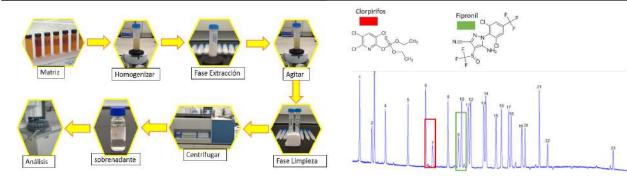


Figura 1. Metodología QuEChERS modificado para preparación de muestra según la norma AOAC 2007.1

Figura 2. Perfil cromatográfico de residuos de plaguicidas analizados en muestras de miel



ELABORACIÓN DE PELÍCULAS A PARTIR DE ACEITE DE HIGUERILLA

Fernando Gordillo Delgado a, Héctor H Hernández Zarta a*, Natalia Rodríguez Quesada a.

^a Grupo de Investigación en Ciencia Aplicada para el Desarrollo de la Ecorregión-GICADE,

Universidad del Quindío, Armenia, Colombia.

* Autor de correspondencia: hhhernandezz@uqvirtul.edu.co

Palabras Claves: Aceite; higuerilla; película; DSC; FTIR.

La producción de plástico y la acumulación de basura resultante de su uso transitorio son problemas que requieren urgente solución; se estima que para el año 2020 se producirán más de 500 millones de toneladas de este material derivado del petróleo y que menos de la mitad se reciclará. Por esta razón es pertinente el desarrollo de procesos alternativos para remplazar esta materia prima no renovable en la elaboración de membranas con características similares. El Ricinus communis es un arbusto conocido comúnmente como higuerilla; de su semilla se extrae el aceite de ricino que es usado en la industria farmacéutica, cosmética, energética y de polímeros. En este trabajo, se desarrolló un método para la elaboración de películas por medio de la autocondensación de este producto y diisocianato de difenilmetano. Se obtuvieron espectros del aceite condensado en el rango del infrarrojo medio, con un espectrofotómetro infrarrojo con trasformada de Fourier SHIMADZU IRPrestige-21, y usando el accesorio ATR-8000A para reflexión total atenuada se obtuvo el espectro de la película. A partir de estos resultados se comprobó la presencia del grupo uretano que confirma la formación del polímero. El espectro de absorción de la muestra, en el rango de luz visible, se determinó por medio de la técnica fotoacústica; mientras que el calor específico y la capacidad calorífica se estimaron a través de la técnica de relajación térmica. Los valores de estos parámetros termofísicos fueron similares a los reportados para polímeros convencionales. En los termogramas, obtenidos con un equipo NETZSCH Polyma 214, se identificaron los valores de temperaturas de transición vítrea (Tg) y de cristalización (Tc) en función de la masa y del espesor de las películas y se encontró que, con el incremento del espesor, Tg aumentó, mientras que Tc disminuyó. Se hicieron ensayos de tensión con un Texturómetro Stabil Microsystems TA-XT2 y se obtuvo el porcentaje de elongación de las muestras; del análisis de los valores obtenidos se halló que la resistencia al estiramiento del material depende del espesor, esto concuerda con lo reportado para polímeros elaborados con este mismo aceite.

REMOCIÓN DE FÓSFORO EN AGUA USANDO EL MATERIAL HÍBRIDO QUITOSANO-2-MICA

Sebastián E. Ramos a*, Mery C. Pazos b.

^a Escuela de Posgrados de la Facultad de Ciencias-Programa Maestría en Química, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, UPTC, Colombia ^b Escuela de Ciencias Químicas de la Facultad de Ciencias, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, UPTC, Colombia

* Autor de correspondencia: sebastian.ramos@uptc.edu.co

Palabras Claves: Remoción; fósforo; quitosano; Na-2-Mica.

El fósforo es uno de los nutrientes esenciales para las plantas y por esto, es adicionado en los cultivos para mejorar los rendimientos. La aplicación de dosis excesivas del agroinsumo genera problemas de eutrofización en los recursos hídricos aledaños. Por esta razón se ha planteado como alternativa para la remoción de fósforo en agua, un nuevo material híbrido compuesto por el biopolímero quitosano, intercalado en un aluminosilicato sintético laminar de alta carga denominado Na-2-Mica. Se utilizó una sonda de ultrasonido para el proceso de dispersión del Na-2-Mica donde se adicionó la solución de quitosano de concentración correspondiente a 2 veces la capacidad de intercambio del aluminosilicato para la intercalación del polímero por el medio de intercambio catiónico. Por medio de análisis de difracción de rayos X, se determinó la modificación del espacio interlaminar del material laminar de 12,2 Å a 28,3 Å. Los análisis de espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier, evidenciaron la presencia de grupos amino y metilo, debido a la presencia de vibraciones de los enlaces N-H y C-H a los 1500 y 2890 cm⁻¹ respectivamente. Por medio del análisis termogravimétrico se determinó el contenido orgánico presente en el material equivalente al quitosano intercalado, donde la cantidad de cationes intercalados correspondió al 30% de la CIC del material. Las micrografías obtenidas del material precursor y el material modificado evidenciaron que se mantuvo la morfología laminar.

Por medio de isotermas de adsorción en batch se evaluó la afinidad química de fósforo por el material Quitosano-2-Mica, donde se evaluaron concentraciones de 5 a 200 mg/L de soluciones de dihidrógeno fosfato de potasio, donde se logró una capacidad máxima de adsorción de 55 mg de /L, mientras que la capacidad máxima de adsorción del quitosano fue de 7,5 mg/L. Por lo tanto, la intercalación del quitosano en el espacio interlaminar de la Na-2-Mica favorece el proceso de adsorción.



EVALUACIÓN DE PARÁMETROS FISICOQUÍMICOS EN LA CÁSCARA DE SACHA INCHI (*PLUKENETIA VOLUBILIS*) PARA EL APROVECHAMIENTO AGROAMBIENTAL

Laura Villa-Prieto a, Anyi C. Olaya a, José D. Herrera a, Luz S. García-Alzate b*.

^a Semillero de Biorremediación, Grupo de Investigación Gerencia de la Tierra, Universidad La Gran Colombia Armenia, Colombia.

b Grupo de Investigación Gerencia de la Tierra, Universidad La Gran Colombia Armenia, Colombia.
*Autor de correspondencia: garciaalzluz@miugca.edu.co

Palabras Claves: Aprovechamiento; cáscara; componentes; caracterización; sacha inchi.

El sacha inchi (Plukenetia volubilis) en uno de los cultivos promisorios en Colombia, es una oleaginosa silvestre perteneciente a la familia Euforbiacea y en los últimos años su cultivo ha tomado importancia económica e industrial en el mercado tanto nacional como internacional debido a sus componentes nutricionales; es importante resaltar que la mayor parte de la cosecha de este tipo de semilla es utilizada para la producción de aceite, lo que genera la torta y la cáscara como residuos del procesamiento de la semilla, siendo posibles subproductos con alternativa de uso agroindustrial, donde su composición porcentual y factor de rendimiento es en cáscara del 45 al 48% y la semilla de 52 a 55%. Por lo tanto, el objetivo de esta investigación fue evaluar parámetros fisicoquímicos en la cáscara de sacha Inchi y buscar alternativas de aprovechamiento agroambiental de la misma. La cáscara de sacha inchi (Plukenetia volubilis) fue obtenida de una microempresa ubicada en el municipio de Montenegro (Quindío) la cual produce aceite y snacks de sacha inchi donde la cáscara es un residuo que no es aprovechado por su dueño; a dicha cáscara se le evaluaron diferentes parámetros fisicoquímicos como pH, actividad de agua, porcentaje de humedad, cenizas, entre otros; para realizar estas pruebas se utilizó la muestra pulverizada y previamente seca cuando el procedimiento lo requería. Los resultados obtenidos en la cáscara de sacha inchi reportaron un pH neutro con un valor de 7,011±0,025; siendo coherente con el porcentaje de acidez titulable con un valor de 0,422±0,086; la actividad de agua fue de 0,196±0,066 a una temperatura promedio de 25,6°C; el porcentaje de humedad de 2,324±0,143; porcentaje de celulosa de 2,609±1,564 y el porcentaje de grasa y cenizas fue de 6,643±0,140 y 1,23±0,042; respectivamente. Se pudo concluir con los resultados obtenidos anteriormente, que a partir de este material vegetal se podría realizar un aprovechamiento agroambiental como es la formulación de un fertilizante natural ayudando a complementar los nutrientes de los cultivos y neutralizar la acidez de los suelos, dando un uso agroindustrial a esta materia prima, que hasta el momento se considera un residuo.

EXTRACCIÓN DE ALMIDÓN DE CÁSCARA DE CACAO THEOBROMA CACAO L. COMO ALTERNATIVA DE BIOPROSPECCIÓN

José D. Herrera ^a, Laura Villa-Prieto ^a, Anyi C. Olaya ^a, Luz S. García-Álzate ^{b*}.

^a Semillero de Biorremediación, Grupo de Investigación Gerencia de la Tierra,

Universidad La Gran Colombia Armenia, Colombia.

^b Grupo de Investigación Gerencia de la Tierra, Universidad La Gran Colombia Armenia, Colombia.

*Autor de correspondencia: garciaalzluz@miugca.edu.co

Palabras Claves: Agroindustrial; biomateriales; bioprospección; extracción; residuos.

La composición química de la cáscara de cacao *Theobroma cacao* L. al reportar alto contenido de lignina y celulosa en su estructura, además de otros componentes que le otorgan cualidades fisicoquímicas determinadas, permiten catalogarla como una materia de dificil degradación; al tener en cuenta esta situación y el aumento considerable de comercialización en Colombia de este producto, anualmente se generan grandes volúmenes de desperdicios, donde estos desechos agrícolas no cuentan con ningún uso adicional para su aprovechamiento; por lo tanto, es necesario desarrollar alternativas para generar uso a estos residuos y así evitar la contaminación ambiental y proliferación de microorganismos patógenos. Por otra parte, el almidón es una sustancia granulada presente en diferentes alimentos, el cual puede utilizarse en diversos procedimientos, donde este componente puede usarse desde la industria alimentaria para otorgar características sensoriales y organolépticas a varios alimentos, hasta la manufactura de papel y materiales biodegradables. Por esta razón, el objetivo de esta investigación fue extraer almidón presente en los residuos agrícolas de la cáscara de cacao; para así estudiar los posibles usos de aprovechamiento del almidón, como alternativa de bioprospección. El material vegetal (cáscara de cacao), fue proporcionado de manera gratuita por productores del departamento del Quindío, a los cuales se les realizó una caracterización fisicoquímica en donde se evaluaron parámetros como el pH, porcentaje de humedad, grasa y fibra, empleando diferentes normas y técnicas; seguido de la extracción del almidón por vía húmeda. Los resultados obtenidos a la cáscara de cacao reportaron un valor de pH 5,46 %, humedad 84,35 %, grasa 0,08 %, fibra 6,80 %, y la extracción de almidón reportó un contenido de 12,04 % en las muestras analizadas. Para concluir con los resultados obtenidos en la caracterización fisicoquímica y la extracción de la macromolécula de almidón a partir de cáscara de cacao *Theobroma cacao* L., se establece que con el empleo de estos residuos pueden generarse alternativas para usar este tipo de residuo agrícolas en diferentes procesos agroindustriales que permitan generar nuevos biomateriales a partir de este subproducto, siendo una alternativa de bioprospección agroindustrial.



ADAPTACIÓN DE LA NORMA ASTM D5002 PARA LA MEDICIÓN DE LA DENSIDAD DE PETRÓLEOS CRUDOS EXTRAPESADOS

<u>Wilson Rey</u> ^a, Edwin Rodríguez ^a, Nelson Briceño ^a, Carlos Naranjo ^b, Gustavo Cabeza ^b, Helmut Salazar ^b. *a Facultad de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad de los Llanos, Colombia. b Empresa Colombiana de Petróleos - Ecopetrol S.A, Colombia.**Autor de correspondencia: <u>jrey@unillanos.edu.co</u>

Palabras Claves: Petróleo crudo extrapesado; ASTM D5002; densidad digital.

En la determinación de la densidad de petróleos crudos se usa la norma ASTM (American Society of Testing Materials) D5002-16 Standard Test Method for Density and Relative Density of Crude Oils by Digital Density Analyzer en el rango de temperatura de 15 - 35 ° C. Acorde con pruebas interlaboratorios (Round Robin Testing) su rango de aplicación es 0.75 - 0.95 mg/L pero, una de las principales características de estos hidrocarburos es que su densidad está por encima de este rango.

La Norma no hace mención alguna al procedimiento que se debe seguir en estos casos, pero sí ofrece información detallada sobre la densidad del agua en el rango de temperatura 0.01 - 99.9 ° C. Allí los valores tabulados varían entre 0.999844 - 0.958421 g/mL de manera respectiva, es decir, por fuera del rango de aplicación tanto por densidad como por temperatura, sin embargo, se menciona su uso como sustancia de referencia.

En este trabajo se propone el uso de la ley de mezclas como una adaptación de la norma ASTM D5002 para la medición de la densidad de crudos extrapesados en equipos analizadores digitales de laboratorio. En la cual se garantiza que tanto la temperatura del ensayo como la densidad de la mezcla resultante están en los respectivos rangos de aplicación de la norma.

Los resultados obtenidos son confiables debido a que la precisión de esta modificación al método está en el rango exigido por la norma.

CARACTERIZACIÓN DE LAS AGUAS DE FORMACIÓN ASOCIADAS A LA PRODUCCIÓN DE CRUDOS EXTRAPESADOS

Edwin Sánchez ^a, Jonathan Riveros ^a, Mónica E. Suárez ^a, Alison J. Torres ^a, Ángela M. Vásquez ^{a*}, Nelson O. Briceño ^a, Dalje S. Barbosa ^b, Carlos E. Naranjo ^b.

^a Facultad de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad de los Llanos, Colombia. ^b Instituto Colombiano del Petróleo (ICP), Ecopetrol S.A, Colombia. * Autor de correspondencia: amvasquez@unillanos.edu.co

Palabras Claves: Aguas de formación; propiedades físico-químicas; diagramas Stiff; salinidad; carbonatos; cloruros; hierro disuelto.

La caracterización del agua de formación durante la vida productiva de los yacimientos provee información sobre su extensión, conectividad, mineralogía de la formación y los cambios en el tiempo de la interacción roca-agua; además, desde el punto de vista económico, contribuye a la evaluación del estado de las tuberías, selección de los materiales a emplear en las diferentes etapas de producción, e identificación de los tratamientos necesarios para optimizar su uso. En este trabajo se evaluó el agua de formación de 25 pozos, cuyo crudo se caracteriza por ser extrapesado. Para la caracterización del agua de cada pozo se emplearon métodos normalizados, y la construcción de los diagramas Stiff, los cuales permiten apreciar las relaciones iónicas existentes en el agua, y evaluar la variación espacial de la mineralización del agua en el yacimiento. En general fue posible determinar que las aguas de formación de estos pozos son ligeramente básicas, y propensas a la corrosión, ya que en su mayoría presenta altas concentraciones de cloruros y hierro; adicionalmente, los diagramas Stiff obtenidos, permitieron identificar zonas con propiedades similares en el contenido de carbonatos, sulfatos y iones en general, demostrando que las propiedades físico-químicas del agua de formación podrían estar relacionadas con la ubicación geográfica de los pozos.



ESTUDIO DE LA REACCIÓN ENTRE ETILENDIAMINA Y DIFERENTES IONES DIAZÓNIO, OBTENCIÓN DE NUEVOS COMPUESTOS TRIAZENOS Y PENTAAZADIENOS. POSIBLE USO DE ESTAS MOLÉCULAS PARA LA FORMACIÓN DE COMPLEJOS DE MERCURIO(II)

Gema Acosta a, Alejandra Osorio a, Alejandra Calderón a, Diego González-Salas a*.

^a Grupo de investigación en Química Ambiental y Tecnologías Limpias QUATELI, Universidad Militar Nueva Granada, Bogotá, Colombia

* Autor de correspondencia: diego.gonzalez@unimilitar.edu.co

Palabras Claves: Triazenos; pentaazadienos; complejos de mercurio (II).

El auge de la minería en Colombia hace que las fuentes hídricas y los ecosistemas en general presenten un alto contenido de mercurio. La determinación de mercurio en la naturaleza es muy importante debido a su alta toxicidad y a su propiedad de bioacumulación que causa graves daños a la salud humana y a los organismos vivos. La obtención de ligandos para la extracción del ion Hg2+ es el objetivo principal en nuestra investigación.

Se encuentran reportes en la literatura donde se es contundente al afirmar que los compuestos triazeno presentan una muy buena afinidad hacia los iones mercurio (II), incluso siendo empleados como reactivos para la detección de esta especie metálica. Los nuevos compuestos triazenos fueron obtenidos como producto principal de la reacción entre etilendiamina y cloruro de p-metoxicarbonilbenceno diazonio en medio básico. Cuando la reacción se efectuó con sales de diazonio con otros sustituyentes en el anillo aromático inesperadamente se obtuvieron compuestos pentaazadieno con buenos rendimientos. Todos los compuestos obtenidos en el presente trabajo fueron caracterizados por sus propiedades físicas y su estructura elucidada por RMN ¹H y ¹³C. Estos nuevos compuestos así obtenidos serán empleados en la formación de complejos con el ion Hg²⁺. El estudio de los complejos de mercurio con ligandos triazenos y pentazadienos obtenidos en esta investigación permitirá establecer una forma de identificar los iones mercurio (II) en disolución acuosa.

NANO-SENSOR ÓPTICO BASADO EN PUNTOS CUÁNTICOS HIDROFÓBICOS DE CDSE/ZNS-ÁCIDO OLEICO PARA LA DETECCIÓN DE IONES MERCURIO EN FASE HETEROGÉNEA

Brayan S. Gómez a*, Gilma Granados a.

^a Universidad Nacional, Colombia

* Autor de correspondencia: <u>bsgomezp@unal.edu.co</u>

Palabras Claves: Puntos cuánticos; hidrofóbico; fase heterogénea; nano-sensor; mercurio;

En este trabajo se preparó un nano-sensor óptico basado en puntos cuánticos (PCs) de CdSe/ZnS (núcleo/capa) con propiedades hidrofóbicas, empleando acido oleico (AO) como agente estabilizante. La síntesis se realizó por el método organometálico mediante invección en caliente a 225 ° C. Sus propiedades fluorescentes fueron determinadas, obteniendo un rendimiento cuántico del 20 %. Se observó el efecto de los iones Hg2+ en las propiedades ópticas del quimiosensor en el que la intensidad de fluorescencia y su absorbancia disminuyó en presencia de Hg²⁺. Además, no se observó un desplazamiento hacia el rojo aparente de las bandas de absorción y de emisión. Adicionalmente, basados en los cambios ópticos y físicos de los PCs se propuso un mecanismo de detección en el que el Hg²⁺ se incorpora dentro de la estructura del nanocristal del PC de CdSe/ZnS-AO debido a la elevada afinidad del selenio y el azufre en el nanocristal por el Hg²⁺. Se caracterizó la capacidad de detección de Hg²⁺ mediante la constante de Stern-Volmer (Ksv) y el límite de detección experimental (LD). Obteniendo, Ksv = 1.24×10^5 M⁻¹ y LD = 15 ppb. Adicionalmente, el quimiosensor obtenido mostro una alta fotoestabilidad y quimioestabilidad en agua. Además, exhibio una mayor selectividad al Hg²⁺ en comparación a los otros metales estudiados. Los resultados obtenidos indican que este nanosensor óptico hidrofóbico presenta un alto potencial para aplicarse en la detección de iones Hg²⁺ en fase heterogénea de manera directa, sensible y con mayor selectividad a los iones Hg²⁺.



NANO-SENSOR ÓPTICO BASADO EN PUNTOS CUÁNTICOS HIDROFÍLICOS DE CDSE/ZNS-GLUTATIÓN PARA LA DETECCIÓN DE IONES MERCURIO EN FASE HOMOGÉNEA

Brayan S. Gómez a*, Gilma Granados a.

^a Universidad Nacional, Colombia * Autor de correspondencia: bsgomezp@unal.edu.co

Palabras Claves: Puntos cuánticos; hidrofílico; nano-sensor; mercurio; óptico.

En este trabajo se preparó un nano-sensor óptico basado en puntos cuánticos (PCs) de CdSe/ZnS (núcleo/capa) con propiedades hidrofilicas, empleando glutatión (GLU) como agente estabilizante. La síntesis se realizó mediante un método modificado de dos pasos, primero se hizo una síntesis organometálica a 225 ° C seguido del intercambio de ligante (GLU) asistido con radiación de microondas. Sus propiedades fluorescentes fueron determinadas, obteniendo un rendimiento cuántico del 26 %. Se observó el efecto de los iones Hg²⁺ en las propiedades ópticas del quimiosensor en el que la intensidad de fluorescencia disminuyó en presencia de Hg2+ y, por otro lado, su absorbancia aumentaba. Además, se observó un desplazamiento hacia el rojo de las bandas de absorción y de emisión. Adicionalmente, basados en los cambios ópticos y físicos de los PCs se propuso un mecanismo de detección en el cual los PCs de CdSe/ZnS-GLU se agregan debido a la desorción del ligante en la superficie del nanocristal por la afinidad del glutatión hacia el Hg²⁺. Se caracterizó la capacidad de detección de Hg²⁺ mediante la constante de Stern-Volmer (Ksv) y el límite de detección experimental (LD). Obteniendo, Ksv = 1.57×10^5 M⁻¹ y LD = 11 ppb. Adicionalmente, el quimiosensor obtenido mostro una alta quimioestabilidad en agua a baja temperatura (3 °C), y fotoestabilidad bajo radiación con luz visible. Además, exhibio una mayor selectividad al Hg²⁺ en comparación a los otros metales estudiados. Finalmente, los resultados obtenidos indican que este nanosensor óptico hidrofílico presenta un alto potencial para aplicarse en la detección de Hg²⁺ en fase homogénea de manera directa, sensible y con mayor selectividad a los iones Hg²⁺.





TEORÍA CUÁNTICA: LOS PANELES SOLARES, EL MODELO ATÓMICO DE BOHR Y ESPECTROS A LA LLAMA DE ELEMENTOS QUÍMICOS. PROPICIANDO DESARROLLO DE COMPETENCIAS CIENTÍFICAS EN 10°

Walter S. Viveros a*.

Universidad Baja California (México), Departamento De Ciencias Naturales y Educación Ambiental de la Institución

Educativa Álvaro Echeverry Perea (Cali – Colombia)

* Autor de correspondencia: wspencervive@gmail.com, spencervive@yahoo.es

Palabras Claves: Teoría cuántica; competencia científica; modelo atómico; obstáculo epistemológico; Resiliencia.

Este trabajo relaciona la presentación de avances de investigación doctoral la cual titula, Química y Biología Cuántica: Análisis Y Superación De Obstáculos Epistemológicos En El Desarrollo De Competencias Científicas. La idea se plantea y viabiliza a través de resultados obtenidos al encuestar a 52 profesores de varias ciudades de Colombia, en aspectos relacionados con la enseñanza en general y de la aplicación de la mecánica cuántica, además de la formación en la teoría cuántica, experiencia, texto guía, Trabajo de laboratorio, directivas ministeriales. Este planteamiento se solidifica bajo la parametrización hecha a estudiantes con respecto a orientaciones recibidas con la teoría cuántica y, que posibilite a ellos poder explicar muchas de las interacciones que tienen en su realidad. Además de la resiliencia. Cuyo objetivo es: Describir las competencias científicas desarrolladas por estudiantes en situaciones de la mecánica cuántica, cuando se permea la enseñanza en relación con su realidad o contexto.

En la metodología se plantea una investigación cualitativa con enfoque etnográfico, las muestras: 4 docentes y 10 estudiantes que han tenido un desempeño sobresaliente y otros identificados con alto riesgo de consumo de drogas sicoactivas o enfermedades y bajo desempeño académico. En el desarrollo de conocimiento científico escolar, aprender haciendo los estudiantes a través del acercamiento a la mecánica cuántica dan cuenta del modelo atómico de Bohr, espectros atómicos a la llama, la dilucidación de: fuegos pirotécnicos, la luz roja y azul de avisos publicitarios, luz blanca emitida por las bombillas de mercurio, luz amarilla de lámparas de sodio. Se planteó el efecto fotoeléctrico y el desarrollo de habilidades respecto paneles solares y su impacto ambiental en relación con generación de electricidad a partir de otras formas. Así, como el cuerpo negro y la explicación de la catástrofe ultravioleta. Los resultados y conclusiones, evidencian resiliencia de estudiantes en el desarrollo de competencias científicas. Modelación matemática, postura crítica, explicación, la formulación de preguntas y la búsqueda de respuestas, la predicción, inferencia, la deducción, conclusiones, es decir como desenlace se puede exponer sobre la importancia de que los jóvenes queden alfabetizados científicamente, desarrollando conocimiento científico escolar.

DOCKING MOLECULAR DE UN PÉPTIDO BIOMARCADOR CON PROTEÍNAS RECEPTORAS PARA LA EVALUACIÓN DE ALTERACIO-NES DE LA BARRERA HEMATOENCEFÁLICA

Jessica A. Martínez a, Karina Vargas a, David Ramírez b, Cristian Buendía a*.

^a Universidad Antonio Nariño, Bogotá D. C., Colombia. ^b Universidad Autónoma de Chile, Santiago de Chile, Chile. * Autor de correspondencia: c.buendia@uan.edu.co

Palabras Claves: Barrera hematoencefálica (BHE); péptidos; biomarcadores; docking masivo, annexina; galectina.

Las lesiones inflamatorias en la materia blanca del parénquima cerebral pueden ser identificadas fácilmente por resonancia magnética de imagen. Sin embargo, la comprensión y evaluación de los mecanismos moleculares que desencadenan modificaciones a nivel de la barrera hematoencefálica (BHE) no están elucidados en su totalidad. Estas alteraciones moleculares son diseminadas en el sistema nervioso central (SNC) siendo el marcador principal de procesos neuroinflamatorios en enfermedades neurodegerativas. En este contexto, el desarrollo y validación de péptidos biomarcadores de reconocimiento a receptores específicos, modulados bajo condiciones neuroinflamatorias, ha sido de especial interés por su aplicación como herramienta de imagen para resonancia magnética, en el estudio en tiempo real y diagnóstico de enfermedades neurodegenerativas.

El presente trabajo valida la eficiencia de la interacción entre el péptido 48 cíclico y 88 lineal y sus posibles receptores en las proteínas Annexina y Galectina presentes en BHE, ambos péptidos actúan como candidatos a biomarcadores específicos de las alteraciones en la BHE bajo condiciones de inflamación. En nuestro estudio se emplearon técnicas computacionales de Docking Masivo Molecular, para modelar la interacción epítopo-receptor. Con un total de 4000 poses analizadas, se concluye que los péptidos 48 y 88 presentan una alta afinidad para las proteínas Annexina y Galactina. El sitio de interacción con la Annexina está ubicado entre los residuos 605 y 689 que comprenden la hélice alfa 5 y 6, donde los aminoácidos Leu-622, Thr-644, Thr-675 y Thr-677 están implicados en la interacción de enlaces puente de hidrogeno con ambos péptidos. Por su parte, la proteína Galactina presenta su sitio activo en la zona cóncava de la hoja β, particularmente, los residuos Lys-63, Trp-68, Ala-1 y Asn-33 son de gran importancia por para la formación de enlaces puente de hidrogeno con ambos péptidos. El péptido 88, también presenta formación de puentes salinos con ambas proteínas y con el aminoácido Asp-649.

Estos hallazgos permitirán a futuro el diseño de una nanopartícula magnética bio-compatible conjugada al péptido biomarcador específico que en el futuro podrá ser una herramienta para el bio-diagnóstico humano de las alteraciones de la barrera hematoencefalica en el desarrollo de enfermedades neurodegenerativas.



ONIOM PARA EL ESTUDIO DE SISTEMAS SUPRAMOLECULARES: CASO ENERGÍAS DE INTERACCIÓN ENTRE NANOTUBOS DE CAR-BONO Y AMINOÁCIDOS

Eliana C. Maya a, Jennifer Riaño a, Emerson Rengifo b*.

^a Escuela de Química, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia ^b Química de Compuestos Bioactivos, Universidad del Cauca, Colombia *Autor de correspondencia: emersonrengifo@unicauca.edu.co

Palabras Claves: ONIOM; Gaussian 09; nanotubos de carbono; energía de interacción; aminoácidos.

En el presente trabajo, se realiza una revisión de la herramienta ONIOM (The Own N-layered Integrated Molecular Orbital Molecular Mechanics) implementada en el programa Gaussian 09 para el estudio de sistemas supramoleculares. La estrategia ONIOM ha mostrado versatilidad y confiabilidad en el cálculo de las propiedades de sistemas que contienen cientos de átomos, imposibles de realizar con los métodos *ab-initio*. Los resultados obtenidos mediante esta estrategia, son de alta precisión y comparables a los obtenidos de métodos Mecanocuánticos, pero a un costo computacional mucho menor.

En este trabajo se aplicó la estrategia ONIOM 2 al estudio de las magnitudes de las energías de interacción y las estructuras de los complejos formados por el nanotubo de carbono armchair (5,5) y los aminoácidos Alanina, Fenilalanina, Cisteina y Treonina. Los resultados obtenidos mostraron la tendencia Alanina > Cisteina > Fenilalanina > Treonina, para las energías de interacción, las cuales fueron comparadas con resultados de la teoría del funcional de la densidad (BLYP), encontrando buen acuerdo para los aminoácidos Treonina y Alanina y pequeñas diferencias para los aminoácidos Fenilalanina y Cisteína.

La importancia de este estudio, radica en la posibilidad de emplear la estrategia ONIOM en el estudio de las propiedades de sistemas supramoleculares que son interesantes desde el punto de vista bioquímico, de la electrónica y de la nanotecnología. En el caso particular de este estudio, las energías de interacción encontradas permiten vislumbrar la posibilidad de obtener experimentalmente los sistemas Nanotubo-aminoácido y usarlos como receptores específicos o liberadores de fármacos por la biocompatibilidad inducida del aminoácido sobre el nanotubo de carbono.

SCREENING VIRTUAL DE FÁRMACOS COMO POTENCIALES PRECURSORES DE AGENTES LIBERADORES DE MONÓXIDO DE CARBONO

Jessica A. Martínez a, Javier Rodríguez a, Cristian Buendía b, Vaneza Lorett a*

^a Universidad Militar Nueva Granada, Bogotá D. C., Colombia.
^b Universidad Antonio Nariño, Bogotá D. C., Colombia.
* Autor de correspondencia: yaneza.lorett@unimilitar.edu.co

Palabras Claves: Monóxido de carbono; cribado virtual; agente terapéutico; modelado molecular.

El monóxido de carbono (CO) es conocido por producir cuadros de hipoxia debido al desplazamiento de Oxigeno (O₂) en la proteína Hemoglobina (HG), sin embargo, estudios recientes han definido que esta molécula (CO) no solo es producida endógenamente, sino que está presente en el metabolismo enzimático. Participa en procesos de señalización intracelular, comportándose como mensajero al ser inducido por el complejo proteico de hemoxigenasas, además presenta interacción directa con los canales de alta conductancia de potasio-calcio (BKCa), desencadenando efectos antiinflamatorios, antiproliferativos, antiapoptóticos, anticoagulantes y citoprotectores. Con base en lo anterior se han propuesto moléculas que liberen CO de manera controlada a fin de evitar los efectos tóxicos que el gas presenta, conocidas como CORM, de sus siglas en ingles CO-Release Molecules. La mayoría de los CORMs son complejos organometálicos que liberan CO de forma espontánea en disolución acuosa, no obstante, su estudio químico de acción como las condiciones fisiológicas que comprenden su metabolismo y eliminación sigue siendo un reto para la industria farmacéutica, debido a dificultades en términos tóxicos y de biodisponibilidad. El objetivo de este trabajo es definir si en la actualidad existen fármacos que puedan tener como segunda función, ser liberadores de CO, a partir de técnicas computacionales de cribado virtual (VS del inglés Virtual Screening), que, mediante un análisis de bases de datos identifiquen los grupos funcionales de interés. Se utilizaron cuatro moléculas intermediarias de la reacción Fenton de 1,3 dihidroxi acetona (DHA), Figura 1. Se encontró que el farmacóforo A está presente en 53 fármacos de los cuales tres están aprobados para su distribución, para C se obtienen 85 resultados con 14 fármacos aprobados, mientras que D, presenta el mayor número con un total de 883 y 262 aprobados para su uso. Finalmente, el principio activo B, está presente solo en 3 fármacos en etapa de estudios experimentales. Estos potenciales nuevos agentes, son candidatos para un segundo cribado virtual que contemple puntuación en bits y un tamaño no mayor a 50 átomos, que genere un total de 8 fármacos para estudios estructurales por métodos mecano-cuánticos indispensables para reducir costos y mejorar la eficiencia en la caracterización fisicoquímica de moléculas liberadoras de monóxido de carbono.

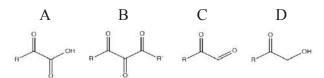


Figura 1. Grupos funcionales utilizados para el cribado virtual.



REPOSICIONAMIENTO DE FÁRMACOS EN LA IDENTIFICACIÓN DE INHIBIDORES POTENCIALES DE LA DEL SISTEMA QUORUM SENSING DE PSEUDOMONAS AERUGINOSA

Laura P. López a*, Patricia Hernández b, Vanessa Gómez b, Luis A. Osorio a, Fabián López-Vallejo a*.

a Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia-Sede Bogotá. Colombia.

b Departamento de Ciencias Básicas, Universidad de la Salle. Colombia.

* Autor de correspondencia: lalopezpi@unal.edu.co; fhlopezv@unal.edu.co

Palabras clave: Acoplamiento molecular; interacción ligando-proteína; LasR; *quorum sensing*; reposicionamiento de fármacos.

Pseudomonas aeruginosa es un patógeno oportunista, siendo fuente importante de infecciones en personas víctimas de quemaduras, con neumonía adquirida en hospital, pacientes inmunocomprometidos, así como aquellos que presentan fibrosis quística. La infección ocasionada por *P. aeruginosa* es usualmente resistente al tratamiento con antibióticos de amplio espectro, conduciendo a la persistencia y empeoramiento en la infección. El sistema de comunicación bacteriano, conocido como quorum sensing (QS), se encuentra regulado por la proteína LasR y su molécula autoinductora 3-oxo-C12-HSL encargada de la modulación en la expresión de genes de virulencia y formación de biopelícula; siendo esto un mecanismo de defensa del huésped. Debido a la resistencia intrínseca que presenta esta bacteria a los antibióticos, se hace oportuna la búsqueda de moléculas que inhiban la expresión de factores de virulencia asociados al OS en la regulación de la densidad celular como agente patógeno. A partir de librerías de fármacos comerciales reportados en la base de acceso libre ZINC15, fueron evaluados 7.200 fármacos mediante acoplamiento molecular, usando una estrategia de consenso con los programas AutoDock y AutoDock Vina. Se seleccionaron las 50 primeras moléculas con alto puntaje de consenso y scaffolds diferentes. Adicionalmente la similitud de los candidatos frente al modo de unión del ligando natural se evaluó mediante huellas digitales de interacción ligando-proteína (PLIF) y el índice de Tanimoto, usando el programa Maestro. Fue posible identificar moléculas con energías de unión mejores a las presentadas por el ligando nativo 3-oxo-C12-HSL en el sitio de unión de la proteína LasR, como: Pranazepide, Exatecan, Savoxepin, Rimonabant, Mitoquidone, Risperdal, Danirixin y Talampicillin. Por otro lado, el Piketoprofen y Lusaperidone presentaron el mejor índice de similitud respecto al ligando nativo. Este estudio permitió la identificación de potenciales moléculas líderes y contribuye a la búsqueda de moléculas inhibidoras de la proteína LasR a partir del reposicionamiento de fármacos mediante estudios de cribado virtual por acoplamiento molecular, disminuyendo los tiempos de búsqueda y los costos asociados a las fases de investigación y desarrollo.





APROVECHAMIENTO DE LA MALTA AGOTADA PROVENIENTE DE LA INDUSTRIA CERVECERA PARA LA ELABORACIÓN DE UNA BEBIDA LÁCTEA CON ALTO CONTENIDO PROTEICO

María A. Amaya M. a*, Sergio Aguirre A. a, Wendy J. Hernández. F. a, David F. Eraso N. a, Andrés F. Rojas G. b.
a Estudiantes de Ingeniería Química. Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales.

^b Profesor asociado, Grupo de Investigación en Aprovechamiento de Residuos (GIAR), Departamento de Ingeniería Química. Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales.

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

Palabras Claves: Malta agotada; biomasa; caracterización estructural; bebida láctea; evaluación técnica; evaluación económica; evaluación ambiental.

A nivel mundial se ha evidenciado una gran preocupación debido al incremento de efectos ambientales negativos causados por el desarrollo económico y la globalización. Debido a esto la sostenibilidad plantea soluciones a problemas actuales sin comprometer la seguridad de las futuras generaciones. Algunos de sus pilares elementales, según la ONU, corresponde a la seguridad alimentaria. Múltiples cadenas agroindustriales producen cantidades significativas de residuos (bagazo de caña, zoca de café, cáscaras de frutas y paja de trigo, entre otros), que generan un impacto ambiental considerable. Sin embargo, debido a su composición, estos residuos se pueden utilizar como materias primas potenciales para obtener productos con múltiples aplicaciones. Un ejemplo de estas materias primas es la malta agotada proveniente de la producción de cerveza, la cual debida a su alto contenido en holocelulosa, se puede reincorporar al proceso productivo y usarse para obtener azúcares, proteína y fibra, entre otros.

El presente trabajo se busca determinar la viabilidad de implementar la malta agotada como materia prima para la producción de una bebida láctea con alto contenido proteico (alrededor del 11% base seca). Para esto, se realizaron dos etapas: una experimental y una de simulación. En la primera etapa, se estableció la caracterización estructural, se realizó la hidrólisis enzimática y la fermentación láctica, para obtener la bebida. Estos resultados son la base para la segunda etapa, que a partir de una simulación en el software Aspen Plus V8.8., se establece el proceso de producción de la bebida. El proceso propuesto consiste en el pretratamiento (disminución de tamaño de partícula, tratamiento térmico, mezclado) de la malta, fermentación y separación (centrifugación). El análisis del proceso propuesto a través de simulación se complementa con la evaluación técnica, económica y ambiental.

Con los resultados obtenidos, se determinó que la malta agotada es una materia prima potencial para distintos procesos biotecnológicos gracias a su composición lignocelulósica. Adicionalmente, es posible obtener una bebida láctea que puede tener aplicaciones alimenticias. De esta forma, se puede lograr que una cadena agroindustrial como la producción de cerveza disminuya los residuos producidos y genere productos de valor agregado que mejoren su desempeño económico.

EFECTO DEL ULTRASONIDO SOBRE LAS PROPIEDADES INTERFACIALES DEL OKARA DE SOJA

Moscoso Ospina, Yeisson A. a,b*, Porfiri, María C. a,b, Cabezas, Darío M. a,b

a Laboratorio de Investigación en Funcionalidad y Tecnología de Alimentos(LIFTA),

Universidad Nacional de Quilmes, Argentina.

b Consejo Nacional de Investigación Científica y Técnicas(CONICET), Argentina.

* Autor de correspondencia: yamoscosoo@uqvirtual.edu.co

Palabras Claves: Okara de soja; ultrasonido; tensión interfacial, viscosidad compleja, emulsiones o/w; estabilidad.

El objetivo de este trabajo fue evaluar el efecto del ultrasonido sobre las propiedades interfaciales de diferentes fracciones de okara de soja, analizando su aplicación en emulsiones acidas O/W. El okara de soja se extrajo de harina desgrasada de soja, esta se dispersó en agua destilada en relación harina: agua 1:10 ajustando a pH 9 con NaOH 4N. Dicha dispersión se homogeneizó (12000 rpm, Ultraturrax), se incubó a 65°C y se obtuvo una fracción insoluble que fue secada en una estufa de aire forzado a 40°C previo lavado 2-propanol (OK). Posteriormente, se realizaron dos variantes sobre el proceso con aplicación de ultrasonido (75% potencia, 10 minutos) pre (SOK) y pos (OKS) extracción alcalina. Las tres fracciones se dispersaron (4% P/V, buffer citrato 10 mM, pH 3) y se almacenaron overnight para favorecer la hidratación de las mismas. La tensión interfacial (aceite de girasol/ agua) se determinó por el método de anillo de du noüy (TD3 LMT 850, LAUDA). Las propiedades reológicas de interface se analizaron a frecuencia constante de 0,1 Hz y deformación de 5%, dentro del rango de viscoelasticidad lineal utilizando una geometría de anillo de du nouy (AR-G2, TA Instruments). Las emulsiones (Φm=0,3) se homogeneizaron en un equipo Ultraturrax (20000 rpm, 2 minutos) analizándose la evolución de sus diámetros de partículas (D[4,3], Malvern Mastersizer 2000E) y la separación de fase (%FA) mediante tubos graduados durante 1 hora. La fracción SOK evidenció un aumento significativo en el contenido de proteínas (Kjeldahl) y presentó, a diferencia de las otras fracciones (OK, OKS), péptidos de bajo peso molecular (x < 14 KDa, electroforesis). Estas características permitieron que dicha fracción (SOK) brindará una mayor disminución de la tensión interfacial y un aumento de la viscosidad compleja con respecto a las demás fracciones. Esto se evidenció en las propiedades emulsificantes, donde las fracciones OK y OKS presentaron un D[4,3] > 100 μm y un %FA~25%, con respecto a SOK con un D[4,3]~50 μm y un %FA~10%. En conclusión, el proceso de sonicación –dependiendo de la etapa del proceso- permite generar modificaciones a nivel composicional y estructural, que modifican significativamente las propiedades emulsificantes del okara de soja.



EVALUACIÓN DE LA CAPACIDAD ANTIOXIDANTE Y CONTENIDO FENÓLICO DE LAS FRUTAS DE MARACUYÁ, LULO, UVA Y CIDRA

Andrés F. Toro ^a, <u>Camila Quintero</u> ^a, María C. Restrepo ^a, <u>Valentina Vásquez</u> ^a, Alba L. Duque-Cifuentes ^{a *}, Clara M. Mejía-Doria ^a.

a Grupo de Investigación Agroindustria de Frutas Tropicales, Universidad del Quindío, Colombia * Autor de correspondencia: albduque@uniquindio.edu.co

Palabras Clave: Capacidad antioxidante; cidra; contenido fenólico; frutos; DPPH

Las frutas y las hortalizas poseen un alto potencial nutricional y terapéutico, debido a la presencia de diferentes compuestos fitoquímicos como los flavonoides y las antocianinas, compuestos fenólicos que han sido relacionados con la actividad antioxidante debido a su capacidad para captar radicales libres causantes del estrés oxidativo. El objetivo de esta investigación, fue evaluar la capacidad antioxidante y el contenido fenólico de los frutos de lulo, maracuyá, uva y la hortaliza cidra. La cuantificación de fenoles totales se realizó por el método de Folin – Ciocalteu, a una longitud de onda de 760 nm y se expresó como equivalentes de ácido gálico (AG)/mg de extracto y la determinación de la capacidad antioxidante se realizó por el método del 1,1-difenil-2-picrilhidrazil (DPPH) medida a una longitud de onda de 517 nm; ambas mediciones se realizaron en la muestra fresca. Las muestras presentaron un contenido de fenoles totales entre 10,0 y 110,0 mg AG/100g extracto; siendo el lulo la fruta con mayor contenido de compuestos fenólicos con una concentración de 110,0 mg AG/100g extracto, seguido de la uva con 101,0 mg AG/100g extracto, maracuyá con 89,0 mg AG/100g extracto y la cidra con 10,0 mg AG/100g extracto; los frutos de lulo y uva presentaron mayor capacidad antioxidante con un % de inhibición mayor al 50%, los frutos de maracuyá y la hortaliza cidra presentaron menor capacidad antioxidante. Los frutos de lulo y uva fueron los que presentaron mayor contenido de fenoles totales y capacidad antioxidante, debido al contenido de carotenoides y vitamina A presentes en ellos

EXTRACCIÓN DE CAFEÍNA A PARTIR DE PULPA DE CAFÉ (COFFEA ARABICA) EMPLEANDO AGUA COMO SOLVENTE VERDE

<u>Diana C. Roldán Herrera</u> ^a, Johanna A. Serna-Jiménez ^{a*}, Laura S. Torres-Valenzuela ^a.

^a Facultad de Ingenierías, Universidad La Gran Colombia Seccional Armenia, Colombia *Autor de correspondencia: sernajimjohanna@miugca.edu.co

Palabras Claves: Cafeína, valorización de subproductos, biocompuestos, HPLC.

El café es un cultivo de gran importancia comercial en el mundo gracias a su aroma y sabor, sin embargo, el proceso del café genera una gran cantidad de residuos que se pueden considerar subproductos a los cuales normalmente no se les da un valor agregado, entre estos la pulpa, que representa el 43,58% del fruto y cuenta con cantidades de importantes de cafeína. Teniendo en cuenta que la pulpa de café tiene un impacto ambiental debido a que no se genera ningún aprovechamiento ni uso convirtiéndose en un foco de enfermedades y algunos autores reportan contenido de Biocomponentes de interés alimentario, farmaceútico y cosmético se evaluó el posible uso en infusiones para la extracción de cafeína utilizando agua como solvente; para esto, se planteó un diseño de superficie de respuesta combinando tiempos entre 1-8 minutos y temperaturas entre 60-90 °C, utilizando como materia prima pulpa de café Arábigo (*Coffea arabica*) previamente deshidratada (CH 12%±0,01), se cuantificó cafeína utilizando un cromatógrafo liquido de alta eficacia HPLC (SHIMADZU, Japón) cuya fase móvil fue metanol y ácido acético y columna C8 marca (RESTEK, USA), un detector de UV a una longitud de onda de 254 nm y una temperatura del horno de 40 °C. Se obtuvo que el tiempo y la temperatura tienen un efecto significativo en el contenido de cafeína obtenido, encontrando que el tiempo y la temperatura óptima en la extracción de cafeína según la superficie de respuesta, fue la combinación de 4,5 minutos y 90 °C obteniendo 51.676 mg/L de cafeína, el valor mínimo de cafeína 21.452 mg/L se obtuvo con 2 minutos y 64 °C; los resultados se compararon con infusiones comerciales en los que se obtuvo valores de entre 26.384-31.128 mg/L de cafeína. Se pudo concluir que la pulpa de café es una alternativa para la obtención de cafeína con fines alimentarios, cosméticos o farmacéuticos generando un valor agregado a algo que actualmente es considerado un residuo.



ESTUDIO DE TRANSFERENCIA DE MASA EN LA PREPARACIÓN DE LAS BEBIDAS DE CAFÉ FRÍAS

Félix Octavio Díaz Arango a**, Julio Cesar Caicedo Eraso b, Luis Fernando Mejía Gutiérrez a.

a Departamento de Ingeniería Universidad de Caldas, Manizales, Colombia.
b Departamento de Sistemas e Informática, Universidad de Caldas, Manizales, Colombia.
*Autor de correspondencia: felix.diaz@ucaldas.edu.co

Palabras claves: Café; preparación de la bebida de café; lixiviación; métodos de preparación de café fríos; extracción.

El proceso de preparación de la bebida de café consiste en tomar el café tostado y molido (5-7 gr de café) y agua caliente ($85 \,^{\circ}\mathrm{C} - 90 \,^{\circ}\mathrm{C}$) para obtener el café agotado y bebida de café. Este proceso depende del tiempo y la temperatura. Los sólidos solubles del café molido se extraen en forma de infusión con agua caliente, llamado también "lixiviación", en este proceso ingresa el café con el agua y salen la bebida y el sólido agotado.

En esta investigación tuvo como propósito analizar el comportamiento de las diferentes etapas de la extracción de los sólidos solubles de café en la preparación de bebida por medio de diferentes cafeteras frías (toody, fretta, torre fría, Mizudachi) y su comportamiento durante la preparación de la bebida.

El café tostado y molido se caracterizó en grano verde (Excelso según la resolución 2 del 2002) y tostado (según la NTC 3534) en el laboratorio de café de la Universidad de Caldas. Este café se manejó para preparar la bebida. Posteriormente se realizó el análisis de sólidos solubles, porcentaje de extracción, a la bebida obtenida según la norma técnica colombiana NTC 4602. Las bebidas obtenidas se evaluaron sensorialmente por medio de una prueba de perfil de sabor QDA (*Análisis Sensorial Cuantitativo Descriptivo*) según la NTC-4883.

Los resultados obtenidos respecto a la comparación de los diferentes métodos fríos se expresaron en un coeficiente de difisividad (KL) para cada bebida preparada.

Se encontraron los atributos sensoriales de fragancia, aroma, acidez, amargo, cuerpo, sabor residual e impresión global para cada bebida preparada según el método de preparación utilizado. El método que presento un mayor coeficiente de difusividad para las bebidas preparadas fue el método mizudachi

EVALUACIÓN DEL REEMPLAZO DE LA SACAROSA EN UN CONCENTRADO DE MANGO EMPLEANDO JARABE DE YACÓN (SMALLANTHUS SONCHIFOLIUS)

Laura M. Cárdenas Castaño ^a, <u>Javier A. Gómez Sierra</u> ^a, Laura Sofia Torres-Valenzuela ^{a*}, Johanna Andrea Serna-Jiménez ^a.

^a Grupo de Investigación Agroindustrialización GIDA, Facultad de Ingeniería,
Universidad La Gran Colombia Seccional Armenia, Colombia.

* Autor de correspondencia: torresvallaura@miugca.edu.co

Palabras Claves: Mangifera indica; Smallanthus sonchifolius; fructooligosacáridos; sacarosa.

Los productos listos para consumir son un segmento alimentario de gran auge en la sociedad actual, dentro de ellos se encuentran los concentrados de frutas, que incluyen dentro de sus ingredientes grandes cantidades de azúcar, a la cual se asocian enfermedades no transmisibles como la obesidad y la diabetes. De acuerdo a lo reportado por la Organización Mundial de la Salud, la diabetes representará la séptima causa de muerte para el año 2030 afectando principalmente a la población juvenil. Como consecuencia, se han evaluado diversas alternativas para reemplazo de la sacarosa y se resalta el uso de fructooligosaácridos que son azúcares no digeribles presentes en diversos alimentos, dentro de ellos el vacón. En este estudio se evaluó el efecto del reemplazo de la sacarosa en un producto concentrado de mango listo para consumo. Para esto productos concentrados de mango preparados con 0 (control), 50 y 100% de jarabe de yacón (JY) como agente de reemplazo de la sacarosa fueron evaluados en sus propiedades químicas (contenido de humedad, actividad de agua, pH y °Brix), el color y la aceptación sensorial a través de un panel no entrenado. Se encontró que el pH, ºBrix, actividad de agua y cambio total de color presentaron diferencias estadísticamente significativas (p<0.05), asociadas al reemplazo total de la sacarosa. La actividad de agua, contenido de humedad y pH fueron mayores en las formulaciones con 100% JY y disminuyeron respecto al incremento de la sacarosa; respecto al cambio total de color, se obtuvieron valores de 6 y 11% en los productos desarrollados con 50 y 100% de JY. Los resultados del análisis sensorial evidenciaron mayor aceptación en los atributos evaluados en los concentrados de mango con 50% JY. A partir de lo anterior se evidencia que se puede realizar un reemplazo parcial de la sacarosa sin que se generen cambios significativos en las variables evaluadas, generando de esta manera productos con menor contenido calórico que podrían contribuir a mitigar los problemas asociados al consumo de azúcar y permitiendo dar usos en la industria alimentaria a un producto promisorio en la región andina, como es el yacón.



ESTRATEGIAS DE COMPLEJACIÓN EN MEDIO ÁCIDO DE CONCENTRADOS PROTEICOS DE SUERO DE SOJA Y POLISACÁRIDOS SOLUBLES DE SOJA PARA LA PREPARACIÓN DE EMULSIONES O/W ESTABLES A LA CONGELACIÓN/DESCONGELACIÓN

Johan S. Henao a,b*, Jorge R. Wagner a,b, Gonzalo G. Palazolo a,b.

^a Laboratorio de Investigación en Funcionalidad y Tecnología de Alimentos(LIFTA),
Universidad Nacional de Quilmes, Argentina.

^b Consejo Nacional de Investigación Científica y Técnicas(CONICET), Argentina.

* Autor de correspondencia: jshenaoo@uqvirtual.edu.co

Palabras Claves: Concentrados proteicos de suero de soja; complejos proteína-polisacárido; emulsiones o/w; estabilidad; polisacáridos solubles de soja.

El objetivo del trabajo fue el estudio comparativo de la estabilidad frente a la congelación/descongelación (-18 \pm 2 °C, 24 h \rightarrow 20°C) de emulsiones o/w acidas (pH 3,0) elaboradas con concentrado proteico de suero de soja (CSS 2,0% p/p) y polisacáridos solubles de soja (SSPS 2,0 p/p), empleando distintas estrategias: complejacion en fase acuosa previa a la emulsificación (CFA) y complejacion interfacial sin y con sonicación (CIF y CIFS, respectivamente). El CSS se preparó a partir de suero de soja por concentración (80 °C, 180 mm Hg), diálisis y liofilización. Las emulsiones CFA se prepararon por homogenización sucesiva de dispersiones acuosas CSS/SSPS y aceite de girasol (fracción másica de fase dispersa, $\Phi_m = 0.2$) a alta velocidad (20.000 rpm, 1 min) y ultrasonido (20 kHz, 40%) amplitud, 3 min) con posterior dilución con agua a pH 3,0 (Φ_m final =0.1). Las emulsiones CIF se prepararon a partir de dispersiones CSS (pH 3,0) y aceite de girasol ($\Phi_m = 0.2$) en las mismas condiciones de homogeneización, con posterior dilución con dispersión de SSPS (Φ_m final = 0.1). Las emulsiones CIFS se prepararon de manera similar a las CIF, con una homogeneización ultrasónica adicional posterior a la dilución. Finalmente, las emulsiones CSS sin polisacáridos (Φ_m final = 0.1) se tomaron como control. La complejación CSS/SSPS a pH 3,0 por interacciones electrostráticas asociativas se evidenció por medidas de dispersión dinámica de luz y turbidez. Las emulsiones CFA mostraron menor tamaño de partícula (D_{43}) que el control y una alta estabilidad a la congelación/descongelación. Aunque las emulsiones CIF exhibieron valores de D₄₃ similares al control, el desplazamiento interfacial casi total de CSS por los polisacáridos, evidenciado en experimentos de adsorción secuencial, impactó negativamente en su estabilidad frente a la congelación/descongelación. Por el contrario, las emulsiones CIFS, con un D₄, significativamente inferior a las CIF, mostraron una estabilidad mejorada y similar a las CFA frente al tratamiento a temperaturas bajo cero. En conclusión, la formación de películas interfaciales mixtas son una excelente alternativa para el diseño de emulsiones alimentarias ácidas sometidas a tratamientos de estrés tecnológico.

EMULSIONES ÁCIDAS SÍMIL-ADEREZO PREPARADAS CON SUERO DE TOFU CONCENTRADO

Agustín A. González Fernández ^a, Johan S. Henao Ossa ^{a, b*}, Gonzalo G. Palazolo ^{a, b}.

^a Laboratorio de Investigación en Funcionalidad y Tecnología de los Alimentos (LIFTA),

Universidad Nacional de Quilmes, Argentina.

^b Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Argentina.

* Autor de correspondencia: jshenaoo@uqvirtual.edu.co

Palabras Claves: Aderezos; emulsiones o/w; estabilidad; suero de tofu.

El suero de tofu(ST) es un efluente industrial generado en la elaboración de tofu, rico fundamentalmente en proteínas, oligosacáridos, calcio e isoflavonas. El objetivo del presente trabajo fue la obtención de emulsiones o/w estables reducidas en grasa y símil aderezo preparadas con suero de tofu concentrado (STC, pH 6,6±0,1) y aceite de girasol como fase dispersa. El STC se preparó por concentración del ST por vacío parcial (180 mm Hg) a 80 °C hasta reducción del 80% del volumen inicial, mostrando la siguiente composición (% p/p): extracto seco, 13,9 \pm 0,2, proteína bruta(N \times 6,25), $2,2\pm0,3$, carbohidratos totales, $6,3\pm0,1$ y cenizas, $3,0\pm0,1$. Las emulsiones se prepararon empleando un dispositivo rotor/estator (12.000 rpm, 5 min), agregando los acidulantes (vinagre de alcohol, ácido cítrico) durante la homogeneización (pH final 3,7±0,3). En la fase acuosa se incluyeron gomas xántica y guar (proporción másica 7:3; 0.5% p/p) y se evaluó el impacto de la concentración de STC (0.25-1,25% proteína p/p) y de NaCl (0,5-2,0% p/p), sobre la microestructura, la distribución de tamaño de partícula, el comportamiento reológico y la estabilidad global (analizador vertical Turbiscan) de las emulsiones durante 90 días de almacenamiento refrigerado (4 °C). Independientemente de la concentración de STC y de NaCl, las emulsiones evidenciaron la presencia de flóculos sin separación gravitacional durante el almacenamiento. A todas las concentraciones de STC, los diámetros promedio D4,3 y D3,2 disminuyeron al aumentar la concentración de sal. Estos disminuyeron por un aumento del contenido de STC (0,25 a 0,75% p/p) pero se observó un incremento a altas concentraciones debido a la presencia de partículas insolubles del STC. Las emulsiones mostraron un comportamiento pseudoplástico y evidenciaron, en los ensayos reológicos oscilatorios, un módulo elástico(G') superior al viscoso(G"). No obstante, la adición de NaCl aumentó significativamente la viscosidad aparente y el módulo complejo(G*) excepto en las emulsiones preparadas con STC 1,25% p/p, donde no se observaron cambios en los parámetros reológicos. Esto sería atribuible a las sales presentes en el STC, las cuales contrarrestan el efecto salino. En conclusión, el STC es un emulsificante adecuado para la obtención de emulsiones ácidas estables símil-aderezo con un comportamiento reológico variable en función de la variación en su composición.



HIERRO NO HÉMICO OBTENIDO DE LA ORTIGA PARA FORTIFICACIÓN DE PRODUCTOS DE PANADERÍA

Luis F. Mejía-Gutiérrez a*, Julio C. Caicedo-Eraso b, Félix O. Díaz-Arango a Departamento de Ingeniería, Universidad de Caldas, Colombia b Departamento de Sistemas e Informática, Universidad de Caldas, Colombia * Autor de correspondencia: luis mejia g@ucaldas.edu.co

Palabras Claves: Hierro no hémico; fortificación; panadería; ortiga; nutrición.

Debido a los elevados niveles de deficiencias en hierro que presenta la población colombiana, especialmente en mujeres y niños, y ante la necesidad de desarrollar productos altamente nutritivos y de calidad dirigidos a la población vulnerable, se desarrolló una galleta fortificada con hierro que permita elevar los niveles de este micronutriente en la dieta de la población, con una ingesta de 80 g/día del producto para un aporte nutricional de 6,4 mg de hierro por porción. Se utilizó ortiga (urtica dioica) que posee hierro no hémico en forma de citrato férrico. Se estableció el nivel de fortificación teniendo en cuenta la ingesta diaria mínima recomendada entre 7 y 10 mg por día, llegando a la formulación final con adición de 8 g de ortiga/kg de producto. Al producto final y al testigo se les realizó prueba de perfil de sabor, permitiendo alcanzar los niveles de fortificación requeridos cumpliendo con los parámetros y especificidades que garantizan un producto no tóxico para el organismo, que cumple con las condiciones nutricionales y sensoriales adecuadas. Los cambios sensoriales en textura, color, y sabor generaron además un cambio en apariencia que aunque no es positivo, tampoco genera el rechazo del producto. La incorporación de ortiga es un método eficaz de fortificación con hierro dado el incremento en el contenido final, que puede sentar bases para aprovechar este recurso natural en otros productos como sopas y ensaladas.

NANOENCAPSULAMIENTO DEL COLORANTE NATURAL EXTRAÍDO A PARTIR DE LA CÁSCARA DEL FRUTO *PATINOA ALMIRAJÓ* CUATREC (PAC)

July C, Ortiz a* y Alis Pataquiva-Mateus a.

^a Semillero de Nanobioingeniería, Departamento de Ingeniería, Universidad Jorge Tadeo Lozano, Colombia. *Autor de correspondencia: julyc.ortiz@utadeo.edu.co.

Palabras Claves: Subproducto agroindustrial; material lignocelulósico; Chocó, valor agregado.

Dada la escasez de investigaciones científico – tecnológicas alrededor del fruto Patinoa Almirajó Cuatrec (PAC), la presente investigación buscó evaluar las propiedades químicas de la corteza del fruto PAC proveniente de la región de Chocó, Colombia; identificando los principales metabolitos primarios y secundarios de importancia alimenticia o cosmética con el fin de realizar el aprovechamiento integral de este subproducto agroindustrial. Es por ello que, se realizó la cuantificación de los componentes extraíbles presentes en la muestra a partir de métodos de extracción con solventes orgánicos tales como acetona al 98% y etanol – agua (1:1) V/V. Una vez realizada la remoción de taninos y resinas, se efectuó el método de hidrólisis ácida cuantitativa (Klason), el cual, determinó la cantidad de lignina contenida en la cáscara. Simultáneamente, el proceso de blanqueamiento se realizó por medio de una solución de ácido acético y clorito de sodio obteniendo la fracción de holocelulosa. Posteriormente, las partículas clarificadas fueron tituladas con el agente valorante sulfato ferroso amoniacal al 0,1 N, para separar y caracterizar las fracciones solubles que componen la holocelulosa total (α , β , y γ celulosa). A seguir, se analizó el estudio de las interacciones moleculares por medio de la espectroscopia de infrarrojo por transformada de Fourier (FTIR) y se determinaron los grupos funcionales orgánicos contenidos en la muestra. Finalmente, el colorante fue encapsulado a nanoescala para evaluar y estudiar sus características y potencial aplicación en productos alimenticios v/o cosméticos.



DEVELOPMENT OF OIL-IN-WATER NANOEMULSIONS TO ENHANCE THE BIOAVAILABILITY OF LYCOPENE

Simón Montoya a*, Carlos J. García a, Mateo Echeverri a, Mariana Villegas a, Catalina Gómez a.

^a Programa de Ingeniería en Nanotecnología, Universidad Pontificia Bolivariana, Circular ¹⁰Nº ⁷⁰-⁰¹, Medellín, Colombia * Corresponding author: simon.montoya@upb.edu.co

Key words: Nanoemulsions; Lycopene; oxidative stress; bioavailability.

The generation of free-radicals in the human body is associated to a wide range of physiological processes and environmental factors. Among these free-radicals are the Reactive Oxygen Species (ROS), which are associated to cell ageing and DNA degradation; its generation could be increased 12- 20 fold during physical activity, thus restricting its health benefits. The human organism has developed different mechanisms to reduce the negative impact of these species, for instance, it can exploit the presence of compounds that prevent the formation of ROS, also known as antioxidants, to prevent cell damage. The antioxidant-ROS balance is fundamental for cell development; therefore, a proper diet must include the presence of these compounds. Among these biomolecules, lycopene appears as an interesting alternative for cell protection. Lycopene is a carotenoid, commonly found in red-fruits, such as tomato, watermelon and guava. In spite of its antioxidant activity, its usefulness is restricted by its low bioavailability, thus, requiring novel alternatives to improve its incorporation in the human body. The use of colloidal systems appear as an interesting option to achieve this purpose, as its potential to increase the bioavailability of lipophilic substances has been studied. Usually, the oleophilic compound is incorporated into the oil phase within an oil-in-water (O/W) nanoemulsion. So, the purpose of this project is to develop a nanoemulsion to enhance lycopene bioavailability for its potential to reduce oxidative stress in high-intensity activities, such as sports.

To evaluate the effect of the oil used for lycopene incorporation different emulsions were manufactured using a low-energy technique known as catastrophic phase inversion and Tween 80 as surfactant. First, different oil blends were manufactured by mixing palm oil (PO) and sunflower oil (SO) to evaluate different compositions without lycopene. Results show that the formulation 70PO/30SO was the most stable emulsion (7 days stable) perhaps due to a balance between medium-chain and large-chain triglycerides on the oil phase. Flocculation was the predominant mechanism of instability for the 70PO/30SO nanoemulsion. In addition, the mean diameter for this nanoemulsion was 535 nm, when lycopene was incorporated in the oil phase a wider diameter distribution, with a mean diameter of 541 nm, was obtained.

In conclusion, an appropriate formulation for O/W nanoemulsion was obtained by a low energy method. Additionally, lycopene was incorporated into the oil phase of nanoemulsions acquiring nanometric oil drops. Finally, there still remains to make in vitro digestion assay to probe the enhanced lycopene's bioavailability.

APLICACIÓN DE LAS TÉCNICAS Z-SCAN Y LIBS PARA EL ANÁLISIS DE ACEITES DE OLIVA

Paola P. Pacheco a*, Orlando Marbello O. a, Juan C. Álvarez a, Rafael A. Sarmiento a, Francisco J. Racedo N. a. ^a Grupo de Espectroscopía Óptica de Emisión v Laser, GEOEL, Universidad del Atlántico, Carrera ³⁰ Número ⁸- ⁴⁹, Puerto Colombia (Atlántico). * Autor de correspondencia: paolapacheco@mail.uniatlantico.edu.co

Palabras Claves: Aceite de oliva; propiedades ópticas no-lineales; plasmas-laser

Se presenta los resultados del estudio de espectros resueltos en tiempo de plasmas-laser de aceite de oliva en la región de 200 nm a 900 nm usando la técnica Láser-Induced Plasma Spectroscopy (LIPS). Los plasmas fueron generados con pulsos láser de 70 mJ, a 532 nm y de 4 ns. Los espectros de la radiación de los plasmas fueron adquiridos con un espectrógrafo Echelle acoplado a una cámara ICCD. Se detectaron elementos de característicos en aceite de oliva tales como C, H, N y O. Los espectros fueron registrados con diferentes tiempos de retardo respecto al inicio del pulso láser. Adicionalmente, se realizó un estudio de las propiedades ópticas no-lineales del aceite de oliva en estado extra virgen y diluido en alcohol etílico a niveles de concentración de 75% y 50%. Para la caracterización de las muestras se utilizó la técnica Z-Scan por transmisión en configuración cerrada. Como fuente de excitación se usó un láser de Nd:YAG emitiendo en 532nm. La técnica permite monitorear en tiempo real el desarrollo de la medida a través interfaz en LabVIEW. A partir de las curvas de transmitancia obtenidas se calculó el índice de refracción no-lineal para cada muestra. Los resultados muestran una variación de las propiedades ópticas no-lineales del aceite de oliva extra virgen cuando es diluido en alcohol etílico.



UTILIZACIÓN DE OKARA DE NUEZ EN LA ELABORACIÓN DE PANIFICADOS LIBRES DE GLUTEN

M. Jimena Correa ^{a,b}, Micaela Di Franco ^b, Agostina Di Menna ^b, Juan J. Burbano Moreano ^{a,b}, <u>Yeisson A. Moscoso Ospina ^{b,c}</u>, Dario M. Cabezas ^{b,c*}.

^a Centro de Investigación y Desarrollo en Criotecnología de Alimentos (CIDCA) - Fac. Ciencias Exactas-UNLP- CCT La Plata (CONICET), CICPBA- La Plata, Argentina.

^b Laboratorio de Investigación en Funcionalidad y Tecnología de Alimentos (LIFTA),

Universidad Nacional de Quilmes, Argentina.

^c Consejo Nacional de Investigación Científica y Técnicas (CONICET), Argentina.

* Autor de correspondencia: dario.cabezas@unq.edu.ar

Palabras Claves: Okara de nuez; ultrasonido; panes; libre de gluten.

Se denomina okara de nuez al residuo que se obtiene a partir de la extracción alcalina de las proteínas presentes en la harina de nuez desgrasada (HND). El objetivo de este trabajo fue evaluar la aptitud del mencionado residuo, sometido o no a un tratamiento de sonicación durante el proceso de extracción, para mejorar la calidad de panificados libres de gluten. Para ello, la HND fue sometida a un proceso de extracción alcalina (pH=10), utilizándose la fracción insoluble que luego de secarse mediante un tratamiento con alcohol isopropílico permitió obtener la muestra denominada OkN. Además, se realizó una variante sonicando la dispersión previo tratamiento alcalino, obteniéndose la muestra OkN-S. Una formulación libre de gluten (sin mejoradores) se utilizó como pan control, posteriormente se agregaron ambas muestras (OkN y OkN-S) en dos niveles (2 y 4%). La calidad panadera se evaluó analizando el volumen específico, dureza de la miga, humedad y un ensavo de evaluación sensorial con un panel no entrenado. La utilización de ambos okaras dio lugar a un incremento del volumen específico respecto al control, siendo mayor en las formulaciones con 4% de agregado. No se observaron diferencias entre OkN y OkN-S. La humedad de los panes se encontró en el rango 43,5-45,3% para todas las formulaciones. Las formulaciones con ambos okaras presentaron migas más blandas respecto al control, siendo este efecto mayor en las formulaciones con 4%. Los panes obtenidos con OkN-S presentaron migas levemente más duras que los panes con OkN. Sin embargo, en el ensayo de evaluación sensorial, las muestras OkN-4% y OkN-S 4% presentaron igual puntuación en relación al aspecto, textura, esponjosidad, sabor y aceptabilidad global, alcanzando en todos los casos un puntaje superior a 7. Estos resultados permiten evidenciar un efecto positivo del okara de nuez sobre la calidad panadera de panes libres de gluten, sobre todo a la mayor concentración analizada (4%). Por otro lado, aunque en la evaluación tecnológica de la calidad panadera se observó un efecto levemente superior de OkN sobre OkN-S, esto no fue apreciado por los consumidores ya que ambas formulaciones fueron igualmente puntuadas.

IDENTIFICACIÓN DE COMPUESTOS DE AROMA PRESENTES EN EL ACEITE DE SACHA INCHI (PLUKENETIA VOLUBILIS L.) POR HS-SPME-GC-MS-O

Lina T. Monroy ^a, <u>Julián A. Zapata</u> ^{a, *}, Sandra A. Torijano ^b, Pedronel Araque ^b, Carlos A. López ^a. ^a Laboratorio de Análisis de Residuos, Universidad de Antioquia, Colombia. ^b Grupo de Investigación e Innovación en Formulaciones Químicas, Universidad EIA, Colombia. * Autor de correspondencia: julian.zapatao@udea.edu.co

Palabras Claves: Sacha inchi; aceite vegetal; compuesto de aroma; química del aroma.

El Sacha inchi (*Plukentia volubilis L.*), también conocido como maní inca, es una planta perenne y oleaginosa de la familia Euphorbiaceae, nativa de la selva tropical de la región andina de América del Sur. Los componentes aromáticos activos provenientes de muestras comerciales de aceite de Sacha inchi, obtenidos de cultivos de Santa Rosa de Osos, Antioquia, Colombia. Mediante la técnica de microextracción en fase sólida acoplada a cromatografía de gases, espectrometría de masas y olfatometría (HS-SPME-GC-MS-O), se identificaron veinte compuestos activos donde se destacan algunos aldehídos y alcoholes entre la familia de compuestos con más potencia aromática. La HS-SPME-GC-O permitió, por primera vez, la identificación de una lista de compuestos aromáticos clave en la formación del aroma del aceite de Sacha inchi.



OBTENCIÓN DE UNA BEBIDA A BASE DE MAÍZ MORADO (ZEA MAYS L.)

Santiago Naranjo Peñaranda a*, Clara M. Mejía Doria a, Alba L. Duque Cifuentes a.

a Grupo de Investigación Agroindustria de Frutas Tropicales, Programa de Química, Universidad del Quindío, Colombia. * Autor de correspondencia: snaranjop@uqvirtual.edu.co

Palabras Clave: Maíz morado; bebida; compuestos fenólicos; análisis microbiológico.

El maíz morado ha demostrado tener beneficios importantes para la salud de los seres humanos por su alto contenido de antocianinas y sustancias fenólicas, estos compuestos son antioxidantes naturales que ayudan en la inhibición de enzimas formadoras de radicales libres.

La obtención de la bebida a base de maíz morado se realizó con base en la elaboración peruana de chicha morada. El término chicha es usado en países de Suramérica para denominar una bebida con graduación de alcohol, pero esta es una bebida no alcohólica, incluso la fermentación es una causa de deterioro de la misma. El objetivo de esta investigación fue la obtención de una bebida de maíz morado sin fermentar.

Se realizaron tres clases de bebida: A (bebida tradicional), B (sin cáscara y sin raquis) y C (con adición de inulina); con los siguientes componentes: piña, manzana, maíz morado, canela y agua en las mismas proporciones; se evaluó cuantitativamente el contenido de fenoles totales y contenido de vitamina C por espectrofotometría, en base a una reacción colorimétrica de óxido-reducción; para seleccionar la bebida con mejores características organolépticas, se realizó un análisis sensorial en los parámetros de color, aroma y sabor; y para determinar la presencia de microorganismos causantes de la fermentación se realizó análisis microbiológico cada 15 días.

Las bebidas mostraron un contenido de vitamina C de 0.30, 0.37 y 0.34 mg/L para A, B y C respectivamente; el contenido de fenoles totales aportado por el maíz morado a las tres bebidas fue de 18,75 mg/mL y ausencia de fermentación durante los 45 días de estudio de las bebidas.

De las tres bebidas obtenidas la que presentó mayor aceptación por la población fue la A, por tener mejores propiedades organolépticas y estabilidad en los 45 días de análisis.

IX SIMPOSIO DE QUÍMICA APLICADA (IX SIQUIA) Y I CONGRESO INTERNACIONAL DE NANOQUÍMICA, NANOFÍSICA Y NANOMEDICINA (I CINNN)

CARACTERIZACIÓN FÍSICO-QUÍMICA, FISIOLÓGICA Y ELÉCTRICA DEL PROCESO DE MADURACIÓN DEL BANANO GROS MICHAEL (MUSA ACUMINATA AAA)

Frank P. Henao a*, Juan M. Flórez b, Jerónimo Rojas D. a.

^a Laboratorio de Biofísica, Universidad de Caldas, Colombia.

^b Laboratorio de Agroindustria, Universidad de Caldas.

* Autor de correspondencia: frank.801416784@ucaldas.edu.co

Palabras Claves: Maduración; banano Gros Michel; físico-química; espectroscopia de impedancia eléctrica.

El proceso de maduración del banano Gros Michel se ha caracterizado a través de sus parámetros físico-químicos y fisiológicos, generalmente por métodos destructivos. El proceso de maduración genera degradación de la pared celular, disminución de turgencia, incremento de permeabilidad y desplazamiento de electrolitos.

La espectroscopia de impedancia eléctrica (EIE) permite la caracterización de material biológico basado en la relación entre las propiedades eléctricas con la composición, contenido de líquidos y parámetros físico-químicos y fisiológicos del material evaluado, de manera sencilla, rápida, no invasiva y no destructiva.

El objetivo fue evaluar la variación de los parámetros físico-químicos, fisiológicos y eléctricos a tres edades de cosecha y durante la poscosecha.

Se realizó la caracterización del banano Gros Michel cultivado en el municipio de Neira (Caldas) con frutos de 21, 22 y 23 semanas después de floración. Cada 2 días y hasta senescencia se evaluaron las variaciones de: peso, firmeza, color, relación pulpa/cáscara, índice de madurez, pH, humedad, almidón, índice de respiración, tasa de etileno y de las variables eléctricas de impedancia, ángulo de fase, resistencia y reactancia capacitiva.

Los resultados mostraron variación en peso, color, pH, relación pulpa/cáscara, relación °brix/acidez, humedad, almidón, tasa de producción de CO₂ y de etileno. De igual manera se encontró variación en los parámetros eléctricos.

Los datos obtenidos muestran correlación entre propiedades fisicoquímicas y eléctricas, también hay una correlación en los parámetros eléctricos, la edad de cosecha y la maduración, así como con la edad fisiológica de consumo lo que muestra que la EIE es una técnica promisoria para identificar los estados de maduración de las musáceas. La fase siguiente consiste en plantear modelos que permitan representar las correlaciones positivas parámetros fisicoquímicos y fisiológicos en función de parámetros eléctricos para con estos poder cuantificar sin necesidad de realizar marchas químicas y disminuir tiempos y costos de caracterización



CARACTERIZACIÓN FÍSICO-QUÍMICA, FISIOLÓGICA Y ELÉCTRICA EN EL MOMENTO DE COSECHA DEL BANANO GROS MICHAEL (MUSA ACUMINATA AAA)

Juan M. Flórez ^a, Frank P. Henao ^{b*}, Jorge A. Martínez ^c.

^a Laboratorio de Agroindustria, Universidad de Caldas.

^b Laboratorio de Biofísica, Universidad de Caldas, Colombia.

^c Estudiante Ingeniería de Alimentos Universidad de Caldas.

*Autor de correspondencia: frank.801416784@ucaldas.edu.co

Palabras Claves: Cosecha; intensidad respiratoria; resistencia; espectroscopia de impedancia eléctrica.

La espectroscopia de impedancia eléctrica (EIE) permite la caracterización de material biológico basado en la relación entre las propiedades eléctricas con la composición y parámetros físico-químicos y fisiológicos del material evaluado, de manera sencilla, rápida, no invasiva y no destructiva.

Se han realizado numerosos estudios para correlacionar los parámetros eléctricos de los vegetales con los parámetros fisicoquímicos y de calidad, haciendo de esta una técnica relativamente barata, rápida y fácil de operar, para determinar las relaciones analíticas entre las propiedades de impedancia y los criterios de calidad. El objetivo ha sido investigar las propiedades de impedancia eléctrica de Banano Gros Michael el día de cosecha y explorar la relación entre los parámetros eléctricos y los parámetros fisicoquímicos con la edad de cosecha desde floración.

El proceso se llevó a cabo a tres edades de cosecha; en 3 rodajas de los dedos centrales de la segunda mano, de 28 mm de diámetro y espesor de 6.5 mm con un impedanciómetro Hioki® 3532-50 LCR-HiTester (Hioki E.E. Corporation, Japón), con diferencia de potencial de 1 voltio, en la zona de relajación beta, se determinaron Z, Θ, R y Xc. Los parámetros fisicoquímicos de humedad, almidón, intensidad respiratoria, relación pulpa piel, firmeza, °brix, Ph y acidez se determinaron según procedimientos A.O.A.C. vigentes.

Se encontró relación lineal entre la frecuencia característica y la intensidad de respiración, la reactancia capacitiva (Xc)y ph. Los valores de ángulo de fase (Θ) no muestran correlación con la edad de cosecha. Se encontró relación entre (parámetros eléctricos de impedancia (Z) y la intensidad respiratoria (IR)). Las variaciones de las propiedades eléctricas con la edad de cosecha y sus correlaciones con las propiedades fisicoquímicas permiten predecir estas últimas, y determinar su potencial uso y vida útil haciendo de este un método predictivo.

En conclusión, la aparición de propiedades organolépticas o sensoriales están relacionadas con la edad fisiológica del fruto al momento de cosecha, se encontraron correlaciones entre características fisicoquímicas y eléctricas que permiten establecer modelos de correlación entre la edad de cosecha y estas, haciendo de esta técnica predictiva para determinar la edad de cosecha a partir de las variables eléctricas.

DESARROLLO DE EMULSIONES TIPO "PICKERING" UTILIZANDO ALMIDÓN NATIVO DE ARRACACHA COMO AGENTE **ESTABILIZANTE**

Santiago Ardila-Chaverra a, Leidy T. Sánchez a, Magda I. Pinzón a, Cristian C. Villa b*.

^a Programa de Ingeniería de Alimentos. Facultad de Ciencias Agroindustriales, Universidad del Quindío. Cra 15 Calle 12 N. Armenia. Quindío. Colombia. ^b Programa de Química. Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías. Universidad del Quindío. Cra 15 Calle 12 N. Armenia. Quindío. Colombia. * Autor de correspondencia: ccvilla@uniquindio.edu.co

Palabras Clave: Emulsiones; pickering; almidón; arracacha.

Las emulsiones tipo "Pickering" son sistemas en los que la fase dispersa se encuentra estabilizada por pequeñas partículas de carácter lipofilicos y que debido a su gran estabilidad han generado gran interés por parte de las industrias alimenticias, cosméticas y farmacéuticas. Uno de los tipos de partículas que más potencial ha mostrado en el desarrollo de este tipo de emulsiones, debido a su gran abundancia en la naturaleza y que es fácilmente modificable por medios químicos y físicos. En este trabajo se plantea el desarrollo de emulsiones tipo "Pickering" utilizando aceite de maíz como fase oleosa y almidón nativo de arracacha como agente estabilizante. Para esto se utilizó un método de alta energía en el que las tres fases fueron mezcladas a más de 12.000 rpm. Las emulsiones fueron caracterizadas en cuanto a su estabilidad en el tiempo, cremado, estructura y tamaño de partícula. En todos los casos se observó que la estabilidad de las emulsiones depende de la concentración del almidón y que el tamaño de las gotas de la fase dispersa disminuye a medida que aumenta el contenido de almidón.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE ALMIDONES MODIFICADOS MEDIANTE FOSFORILIZACIÓN

<u>Diana A. Arbeláez</u> ^a, <u>Luisa M. Novoa</u> ^a, Magda I. Pinzón ^b, Leidy T. Sánchez ^b, Cristian C. Villa ^{a*}.

^a Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías, Universidad del Quindío, Colombia.

^b Programa de Ingeniería de Alimentos, Facultad de Ciencias Agroindustriales, Universidad del Quindío, Colombia.

* Autor de correspondencia: cvilla@uniquindio.edu.co

Palabras Claves: Almidón fosforilado; almidones modificados, caracterización térmica.

El almidón es el segundo biopolímero de mayor abundancia en la naturaleza, constituyendo la mayor fuente de reserva de energía de las plantas. Debido a su abundancia, y a la facilidad con la que puede modificarse química, física y enzimáticamente, el almidón ha encontrado varias aplicaciones en las industrias de alimentos, farmacéuticas y cosméticas. Una de las modificaciones que ha generado mayor interés, es la fosforilización o la inclusión de grupos fosfato en la estructura del granulo. Esta modificación mejora la solubilidad en agua de la molécula, además de permitir una mayor interacción con las células, cuando se utilizan como vehículos de moléculas bioactivas. En este trabajo se plantea la síntesis y caracterización de almidones fosforilados a partir de almidón de papa y plátano como material de partida para el desarrollo de nanovehículos para el encapsulamiento de moléculas anticancerígenas. Los almidones fueron caracterizados mediante FTIR, DRX, DSC, además de evaluar sus propiedades fisicoquímicas: poder de hinchamiento y solubilidad en agua comparando siempre con los almidones no modificados. Se observó que la fosforilización permite mejorar la solubilidad en agua de los almidones y cambiar considerablemente su temperatura de gelatinización, al igual que modificar su estructura semicristalina.

EXTRACCIÓN DE PECTINA OBTENIDA A PARTIR DE PULPA DE CIDRA SECHIUM EDULE (JACQ.) SW

María de los Ángeles Baquero a, Daniela Hoyos a, Clara M. Mejía a*.

a Grupo de Investigación Agroindustria de Frutas Tropicales, Universidad del Quindío, Colombia. * Autor de correspondencia: <u>cmmejia@uniquindio.edu.co</u>

Palabras Clave: Extracción de pectina; hidrólisis ácida; cidra; porcentaje de rendimiento.

La pectina es una macromolécula de origen natural, compuesta principalmente por una unidad de ácido D-galacturónico unidas por enlaces α-1, 4-glicosídicos; se encuentra siendo parte de los componentes principales de la pared celular primaria y pared celular media de las plantas. Generalmente es extraída de cítricos, manzana y remolacha, siendo los cítricos los más empleados para su obtención.

En este trabajo se realizó la extracción de pectina en frutos de cidra (Sechium edule) ecotipo verde clara lisa, empleando la pulpa de cidra fresca rallada. Los frutos de cidra fueron lavados y pelados para retirar la corteza y la semilla; seguidamente la pulpa fue rallada. Para la extracción se empleó la hidrólisis ácida y para su precipitación alcohol al 95%. Se evaluaron 3 tiempos de extracción (30 min, 75 min y 120 min) y como agente acidulante el ácido cítrico a una temperatura de 75 °C y pH de 2. Se observó que el almidón interfiere en el porcentaje de rendimiento por lo cual se realizó un proceso de precipitación del almidón previo a la extracción. El tiempo de extracción de 75 minutos fue el que presentó un mayor porcentaje de rendimiento de 25,27 % ± 1,83. Se evidencia que la pulpa de cidra es un material potencial para la extracción de pectina teniendo en cuenta, que los cítricos presentan un porcentaje de rendimiento que oscila entre el 12% y el 15%.



APLICACIÓN DE UN SISTEMA DE VISIÓN ARTIFICIAL (SVA) PARA EL ANÁLISIS DEL COLOR DE LA CARNE DE BOVINO EN TIEMPO REAL

Olga L. Torres Vargas a*, Álvaro A. Navarro Pérez b, Yessica V. Galeana Loaiza a.

a Grupo de Investigación en Ciencias Agroindustriales, Universidad del Quindío, Colombia

Palabras Claves: Carne; espectrofotómetro; sistema de visión artificial; técnicas no invasivas.

El color es una de las características organolépticas que más influye en la aceptabilidad de la carne y juega un papel importante en la decisión de compra por parte del consumidor. Uno de los problemas que presenta la evaluación del color es la metodología empleada para la obtención de información significativa, que permita determinar la calidad de la carne de una forma no invasiva, rápida, en situ y en tiempo real. Los equipos de medición del color son costoso y especializados, requieren de una infraestructura adecuada para la realización de las medidas, no son portables y las muestras deben ser llevadas al laboratorio para realizar su análisis. Por lo tanto; el objetivo de esta investigación fue la aplicación de un sistema de visión artificial (SVA) para la evaluación del color en carne de bovino. Inicialmente fue establecida una metodología para la adquisición de la imagen en el SVA aplicando algoritmos de visión computacional en los programas C++ y Matlab. Posteriormente fueron realizadas las medidas de los parámetros de color L*, a*, b*, en muestras de carne de bovino con diferentes niveles de grasa y almacenadas a 4°C durante 3, 5, 10, 15 y 22 días, en el SVA y en un espectrofotómetro HunterLab. Los valores obtenidos fueron analizados aplicando un análisis de varianza para establecer similitudes entre ambos sistemas de medida, mediante el uso del software Statgraphics Centurion XVII. Los resultados de color obtenidos para la carne en el SVA fueron equivalentes a los obtenidos en el espectrofotómetro, indicando su posible uso como una herramienta del control de calidad en la industria cárnica.

^b Grupo de Investigación en Desarrollos Tecnológicos, Universidad del Quindío, Colombia * Autor de correspondencia: <u>oltorres@uniquindio.edu.co</u>

OPTIMIZACIÓN DE LA FORMULACIÓN DE UNA PASTA ALIMENTICIA CON QUINUA Y ALMIDÓN DE YUCA, APLICANDO LA METODOLOGÍA DE SUPERFICIE DE RESPUESTA (MSR)

Mariana Lema Gonzáles a, Yessica V. Galeano Loaiza a, Olga L. Torres Vargas a*.

^a Grupo de Investigación en Ciencias Agroindustriales, Universidad del Quindío, Colombia * Autor de correspondencia: <u>oltorres@uniquindio.edu.co</u>

Palabras Claves: Extrusión; harina de quinua; optimización; pasta alimenticia; textura

El uso de harina de quinua (*Chenopodium quinua*), y almidón nativo obtenido a partir del proceso de rayado de la yuca (Manihot esculenta), pueden ser una mezcla nutricionalmente conveniente en la fabricación de productos sin gluten. La presente investigación tuvo por objetivo optimizar la formulación de pasta alimenticia tipo spaghetti y su caracterización textural. Para el proceso de optimización se utilizó el software Statgraphics Centurión XVII, inicialmente fue creado el diseño experimental, aplicando la metodología de superficie de respuesta (MSR), seleccionando como variable de respuesta: la dureza de la pasta y 3 factores experimentales con sus correspondientes niveles: harina de quinua (60 - 75%), agua (25 - 40%) y almidón nativo (1,5 - 5%). Una vez identificadas las variables y los factores, fue seleccionado el diseño Box-Behnken, obtenido como resultado 15 formulaciones, las cuales fueron preparadas y llevadas a un proceso de extrusión con el fin de homogenizar y texturizar las materias primas, durante el proceso fueron contraladas las variables: temperatura (50-70°C), velocidad del tornillo de 60 rpm y una alimentación continua. Finalmente, las pastas obtenidas fueron analizadas texturalmente en su dureza, empleando una prensa universal de textura TA-XT2 (Stable Micro Systems, Godalming, surrey, UK). La optimización del diseño fue analizada estadísticamente mediante un análisis de varianza (Anova) con p<0.05. Los resultados obtenidos indicaron que la formulación óptima de la pasta consistió en 67,5/100 gr de harina de quinua, 27,5/100 gr de agua y 5/100 gr de almidón. La pasta obtenida cumple con los parámetros establecidos en la NTC 1055 de 2008, confirmando así que el método propuesto permite determinar la mejor formulación de la pasta alimenticia tipo spaghetti, que cumple con las expectativas de textura de los consumidores.



CARACTERIZACIÓN MORFOLÓGICA, ESTRUCTURAL Y TÉRMICA DE MICROFIBRAS DE CELULOSA AISLADAS DE RESIDUOS **AGROINDUSTRIALES**

Yessica V. Galeano Loaiza a, Cristian C. Villa Arrubla a, Olga L. Torres Vargas a*

^a Grupo de Investigación en Ciencias Agroindustriales, Universidad del Quindío, Colombia * Autor de correspondencia: <u>oltorres@uniquindio.edu.co</u>

Palabras Claves: Corona de la piña; microfibras de celulosa; residuos agroindustriales; tallo del maíz; cascara de plátano

Diversos residuos generados en la industria alimentaria han sido identificados como una fuente sostenible para la obtención de microfibras de celulosa (MFC), convirtiéndolas en materias primas prometedores para ser utilizadas como material de refuerzo y mejorar las propiedades mecánicas y de barrera de los envases utilizados en la industria de alimentos. Como una alternativa para dar valor agregado a los residuos obtenidos de las cosechas en el departamento del Quindío, el objetivo de esta investigación fue extraer y caracterizar microfibrillas de celulosa obtenidas de la cascara del plátano dominico-hartón (musa AAB simmonds) (MFCP), del tallo del maíz (Zea mays L. Gramíneas) (MFTM) y de la corona de la piña (*Ananas comosus* (MFP). Las MFC fueron obtenidas mediante la aplicación de un proceso químico, inicialmente fue realizado un tratamiento alcalino de blanqueo y de hidrólisis ácida a pH controlado. Las propiedades morfológicas de las microfibrillas obtenidas (MF), principales grupos funcionales, el tamaño de partícula y el análisis térmico se realizaron mediante microscopia electrónica de barrido (SEM), espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier (FTIR), difracción de rayos X (DRX) y calorimetría diferencial de barrido (DSC) respectivamente. La morfología de las MF corresponde a diámetros y longitudes uniformes, confirmando la eficiencia del método de aislamiento, los estudios de difracción de rayos X mostraron que las MF exhiben una estructura de celulosa de tipo I, con un índice de cristalinidad del 49.13, 64.42 y 56.11% respectivamente. Los análisis térmicos revelaron que las MF obtenidas exhiben propiedades térmicas mejoradas con patrones similares y con cambios de fase en la composición de las diferentes muestras. Por lo tanto, las MF aisladas de los diferentes residuos agroindustriales tienen una aplicación potencial como elementos de refuerzo en la industria de envasado alimentario.

OBTENCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE UNA PELÍCULA PLÁSTICA A BASE DE ALMIDÓN FUNCIONALIZADO

<u>Jaiver Osorio</u> ^a, Andrés Mesa-López ^a, Carolina Caicedo ^b, Yenny Ávila-Torres ^{c*}. ^a Grupo QCOAMMSB. Programa de Química Industrial. Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia. ^b Grupo GIDEMP, ASTIN, SENA; Santiago de Cali, Salomia, Colombia. ^c Grupo QUIBIO, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad Santiago de Cali, Pampalinda, Santiago de Cali, Colombia. *Autor de correspondencia: <u>yennytorres@usc.edu.co</u>, <u>carolinacaicedo@gmail.com</u>

Palabras Claves: Almidón funcionalizado; caracterización; película plástica; ácido graso; termogravimetría.

La disminución del impacto ambiental en términos de biodegradabilidad o compostabilidad, permite explorar nuevos materiales plásticos no derivados del petróleo, como lo son polímeros naturales extraídos de alimentos. En este contexto, a partir de este trabajo de investigación se obtuvo almidón de papa (P) y de achira (A) con un contenido alto de amilosa, mejorando su plastificación con glicerol (G) y sorbitol(S) en proporción (70: 30). Por otro lado, con el objeto de crear una barrera efectiva contra el vapor de agua y proporcionar un soporte estructural, se adicionaron ácidos grasos (ácido oleico (L) y ácido láctico (L) en diferentes proporciones 3, 6 y 9% en peso. Estas mezclas fueron obtenidas en un reómetro de torque a 130 °C durante 10 min. La caracterización térmica realizada mostró mayor estabilidad para las muestras de TPSL>TPS, los valores en la temperatura de degradación variaron entre 230 °C hasta 280 °C, mientras que para las transiciones térmicas correspondientes a la temperatura de gelatinización y fusión mostraron una disminución en la cristalinidad para las muestras con ácido oleico al 6%, estos resultados fueron congruentes con el análisis morfológico. Los resultados derivados del análisis reológico oscilatorio tuvieron un comportamiento viscoso en las muestras de TPS, mientras que la presencia del ácido generó transiciones viscosas a elásticas. Por último, se evidenció una reducción en la hidrofilicidad del TPS modificado debido a que algunas de las muestras incrementaron el valor del ángulo de contacto hasta en un ~46%.

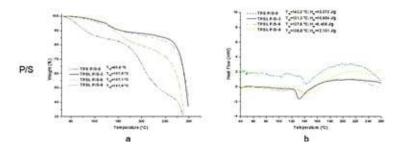


Figura 1. Termogramas de TPS con ácido láctico a) TGA y b) DSC.



CARACTERIZACIÓN QUÍMICA, FISICOQUÍMICA, TÉRMICA Y ESTRUCTURAL DE LA HARINA EXTRAÍDA DE TRES VARIEDADES DE ARRACACHA (ARRACACIA XANTHORRHIZA)

Angie Mallerly Jiménez Rico a, Magda I. Pinzón b, Leidy T. Sánchez b, Cristian C. Villa a*.

^a Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías, Universidad del Quindío ^b Programa de Ingeniería de Alimentos, Facultad de Ciencias Agroindustriales, Universidad del Quindío. Carrera ¹⁵ Calle ¹²N, Armenia Q. *Autor de correspondencia: ccvilla@uniquindio.edu.co

Palabras Claves: Harina; arracacha; tubérculos.

La arracacha (*Arracacia xanthorrhiza*) es uno de los tubérculos con mayor probabilidad de estudio y de uso por medio de la comunidad científica, a nivel regional, su uso es considerado desde tiempos ancestrales no sólo por su valor comercial, sino por sus características para el consumo humano. Teniendo en cuenta que Colombia es el mayor productor de arracacha a nivel mundial y que este es un tubérculo ancestral y nativo de la región andina, resulta de gran importancia realizar una caracterización fisicoquímica de la harina de las diversas variedades de arracacha para la elaboración de películas biodegradables. La harina es un producto obtenido por la molienda de diferentes especies vegetales, llevadas a contenidos óptimos de humedad para su almacenamiento y conservación. En el caso de la arracacha la producción de harina es una de las opciones para la conservación de sus características nutricionales.

En este trabajo se planteó la caracterización química, fisicoquímica y térmica de la harina obtenida a partir de la arracacha blanca, la arracacha amarilla y la arracacha morada, estableciéndose el alto contenido de almidón de la harina, además de alto contenido de fibra.

IX SIMPOSIO DE QUÍMICA APLICADA (IX SIQUIA) Y I CONGRESO INTERNACIONAL DE NANOQUÍMICA, NANOFÍSICA Y NANOMEDICINA (I CINNN)

ESTABILIDAD EN ALMACENAMIENTO DE UN BIOINSUMO PARA CONTROL IN-VITRO DE RALSTONIA SOLANACEARUM, CAUSANTE DE LA ENFERMEDAD DE MOKO EN PLÁTANO

Francia M. Mejía-Lotero a, Andersson Ospina d, Johanna A. Serna-Jiménez d, Juan E. Salcedo d.

Laura S. Torres-Valenzuela a.

^a Grupo de Investigación Agroindustrialización GIDA, Universidad La Gran Colombia Armenia, Colombia. * Autor de correspondencia: mejialotfrancia@miugca.edu.co

Palabras Claves: Bioinsumo; ralstonia solanacearum; estabilidad; plátano.

El plátano es el cuarto cultivo más cosechado en el mundo. A su vez, hace parte de los cultivos tradicionales de las familias campesinas colombianas, quienes consumen cerca del 96% del total de la producción. En la actualidad, el departamento del Quindío cuenta con 14000 hectáreas comprendidas entre plátano y banano, convirtiéndola en la segunda explotación agrícola del departamento.

Dentro de los mayores inconvenientes que se presentan para su producción está la enfermedad denominada "moko" causada por la bacteria ralstonia solanacearum. Para el año 2018, en el departamento del Huila, 700 Hectáreas presentaron incidencia de esta enfermedad y en el Quindío su incidencia para 2012 llegó a las 500 hectáreas. Debido a su fácil propagación, daño total de la planta y pérdidas parciales o totales de las cosechas, el Instituto Colombiano Agropecuario (ICA) ha planteado un protocolo correctivo basado en la aplicación de glifosato en una concentración al 20% (v/v) sobre los focos en donde hay presencia de la enfermedad derivando así en graves impactos ambientales, sociales y económicos, y la imposibilidad de volver a sembrar durante el tiempo que dure la cuarentena.

Existen alternativas agroecológicas como las empleadas por los productores agroecológicos en Filandia Quindío, que implementaron un bioinsumo llamado extracto fermentado de plantas (EFP) en donde afirmaron percibir resultados positivos en sus cultivos para el control de dicha enfermedad. Este extracto incluye plantas clasificadas en 5 grupos para los diferentes tipos de plantas empleadas, se evaluó la vida útil del extracto durante 16 días bajo condiciones controladas de temperatura y humedad relativa (condiciones de abuso) para así determinar las cinéticas de cambio fisicoquímicas y evaluar su capacidad inhibitoria luego de haber sido sometido a estas condiciones. Se compararon sus resultados con el control que se mantuvo a condiciones ambiente. Aunque el EFP descendió su capacidad inhibitoria luego de ser sometido a condiciones de abuso por 16 días, continuó siendo mejor que el glifosato en las condiciones de almacenamiento evaluadas en cuanto a control de ralstonia solanacearum; y por lo tanto se mantiene como una alternativa que debe ser considerada para el manejo de la enfermedad.



SELECCIÓN DEL MEJOR DISEÑO EXPERIMENTAL Y EL MEJOR PARÁMETRO ESTIMADO DE GERMINACIÓN EN EXPERIMENTOS CON ESTIMULACIÓN MAGNÉTICA EN SEMILLAS DE MAÍZ

Juan P. Penagos ^a, <u>Dayana Arias</u> ^b, Jessica López ^b, Valentina Montes ^b, Javier I. Torres ^c, Juan D. Rivera ^{a, d*}.

^{a*} Departamento de Análisis Estadístico, Dirac Consultorías S.A.S., Colombia

^b Estudiante de Ingeniería de Alimentos, Universidad de Caldas, Colombia

^c Departamento de física, Universidad de Caldas, Colombia ^d Departamento de química, Universidad de Caldas, Colombia

* Autor de correspondencia: juan.rivera@ucaldas.edu.co

Palabras Claves: Diseños factoriales; diseño de bloques divididos; tiempo medio de germinación; densidad de flujo magnético; gradiente magnético.

Se ha demostrado que la aplicación de campos magnéticos a las semillas genera efectos positivos en la germinación. La mayoría de los análisis estadísticos que se han aplicado para determinar dichos efectos se basan en diseños factoriales, teniendo como respuesta el tiempo medio de germinación (TMG); sin embargo, este tipo de análisis generan ruidos experimentales elevados, los cuales proporcionan imprecisiones en los resultados. El presente trabajo tiene como objetivo identificar el mejor diseño experimental para estimar los efectos debidos a los factores de estudio sobre los parámetros de germinación, además de la respuesta que otorgue mayor precisión y disminución del ruido para dicha estimación. Para cumplir con estos objetivos se diseñaron dos tipos de experimentos a saber: factorial simétrico 4² y otro dentro de la clasificación de diseños de parcelas divididas en varias etapas como lo fue el de bloques divididos completo. En ambos casos se utilizaron los factores densidad de flujo magnético con niveles (0, 55, 458 y 144) mT, y volumen de agua con niveles (12.0, 16.8, 21.3 y 23.6) mL. Cada unidad experimental constó de 25 semillas, donde para el diseño factorial se utilizaron 4 réplicas, mientras que para el diseño de parcelas divididas se utilizaron 4 bloques. Los resultados obtenidos respecto al uso del diseño en bloques divididos completo y del diseño bifactorial, hace evidente que es posible mediante el primero obtener mayor conocimiento respecto al número de fuentes de variación, lo que conduce a estimar la existencia real de interacción entre los factores de estudio, lo cual con el segundo diseño no se logra. También se elucida, al realizar el análisis pertinente del ruido experimental, que el TMG presenta elevados niveles de éste al compararse respecto a t50, lo cual no permite elucidar el efecto de los tratamientos de manera precisa. Se concluye entonces que el diseño experimental y el análisis adecuado para los experimentos de germinación de semillas con influencia de campos magnéticos corresponde con el de bloques dividido completo. Adicional a esto, la respuesta que otorga menor ruido experimental y por ende mayor precisión es el t50 frente a TMG.

EVALUACIÓN DE LA HUELLA HÍDRICA Y VALOR NUTRICIONAL DE COMIDAS REPRESENTATIVAS DE LAS REGIONES NATURALES DE **COLOMBIA**

Eliana J. Mantilla a, Lina P. García a, Sergio I. Blanco a*.

^a Escuela de Ingeniería Metalúrgica y Ciencia de Materiales, Universidad Industrial de Santander, Colombia. * Autor de correspondencia: siblanco@uis.edu.co

Palabras Claves: Huella hídrica; valor nutricional, alimentación, impacto ambiental.

En la última década ha ido en crecimiento el interés por el desarrollo sostenible de nuestros recursos y por optimizar su uso, debido a las grandes consecuencias que se han presentado a nivel global como lo son el cambio climático, que cada vez es más evidente por causa de la sobrepoblación y el crecimiento del sector industrial. Uno de los principales impactos sobre la naturaleza se encuentra en la deforestación de las selvas, la cual en la amazonia es debida en gran parte a la cría de ganado (aprox. 65-70%), y a la agricultura a pequeña (20-25%) y a gran escala (5-10%). El estilo de vida occidental que produce un consumo masivo de alimentos, además de generar un impacto medioambiental, se relaciona con un desorden perceptible en el cuerpo humano, evidenciado en el aumento del porcentaje de obesidad a nivel mundial, específicamente, en Colombia según resultados de la ENSIN 2015 (Encuesta Nacional de Situación Nutricional) se incrementó 5,2 puntos con respecto al 2010. Es por ello, que en el presente trabajo se evaluó la huella hídrica generada por cinco comidas representativas de la gastronomía colombiana y la relación directa con los valores nutricionales que estas aportan. Se determinó el impacto ambiental que genera su preparación incluyendo la huella hídrica de cada uno de los ingredientes. Las comidas evaluadas se seleccionaron en función de las cinco regiones que integran el país: Caribe, Amazonía, Pacífico, Orinoquía y Andina. Se determinó que las comidas correspondientes a las regiones de la Orinoquía y Andina presentan una huella hídrica superior que el resto de los platos evaluados, siendo los de menor impacto ambiental aquellos donde la fuente de proteína animal proviene de pescados, el Bacalao de pescado seco (región Pacífico) y el Pirarucú (región Amazónica). Los resultados del proyecto pueden aportar y liderar la reflexión en temas que son prioridad nacional como es la salud de los colombianos además de demostrar que estudios de este tipo pueden servir de guía para modificar los patrones alimenticios para reducir el impacto ambiental y aumentar el valor nutricional.



EFECTO DE LA ADICIÓN DE CRIO-CONSERVANTES EN LAS PROPIEDADES REOLÓGICAS DE PURÉS DE PAPA CRIOLLA (SOLANUM PHUREJA)

Camilo Lord ^a, Cristian C. Villa ^b, Leidy T. Sánchez ^{a*}.

^a Programa de Ingeniera de Alimentos. Facultad de Ciencias Agroindustriales. Universidad del Quindío.

Carrera 15, Calle 12 N.

b2 Programa de Química. Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías. Universidad del Quindío. Carrera 15, Calle 12 N.
* Autor de correspondencia: technologías. Universidad del Quindío. Carrera 15, Calle 12 N.

Palabras Claves: Crio-conservantes, purés, hidrocoloides, papa criolla.

Existe un creciente interés en el desarrollo de alimentos procesados que mantengan las características sensoriales de los alimentos naturales y que además sean resistentes a los procesos a los que normalmente son sometidos los alimentos. En este sentido, los purés se han convertido en uno de los alimentos que mayor interés ha generado, debido a su facilidad de deglución que es conveniente tanto para niños como para personas mayores. Una de las maneras de aumentar la aplicación de este tipo de alimentos es la adición de crio-conservantes que permitan mantener las propiedades fisicoquímicas de los purés que han sido sometidos a procesos de congelación-descongelación. En este trabajo se evaluó el efecto de la adición de crioconservantes como goma xanthan, carragenina, pectina y la mezcla de estos, durante el almacenamiento en congelación sobre las propiedades reológicas y fisicoquímicas de purés de papa criolla, las propiedades reológicas se basaron en ensavos dinámicos oscilatorios y en estado estacionario, así como las propiedades fisicoquímicas (humedad, color, pH y sinéresis). En cuanto a las propiedades fisicoquímicas, el contenido de humedad en los purés formulados varió entre 57–74%, no presentó una variación importante (p>0,05) con respecto a la formulación, sin embargo, en el almacenamiento durante el proceso de congelación/descongelación este parámetro disminuyó en mayor proporción en aquellos purés que contenían carragenina como crioconservante. Tanto la adición de crioconservantes. En cuanto a las coordenadas del color, el parámetro L* no tuvo una variación significativa (p<0,05) ni con la formulación ni con el tiempo de almacenamiento, sin embargo, los parámetros a* y b* si tuvieron efecto sobre el color en el almacenamiento debido al pardeamiento enzimático. Durante el proceso de congelación/descongelación se observó una disminución de la viscosidad aparente. Por otra parte, el análisis de las propiedades viscoelásticas de los purés pone de manifiesto lo anteriormente descrito, puesto que se observó un efecto significativo (p<0,05) de la formulación de los purés en la componente elástica G' en contraste con una notable disminución en la componente viscosa G".

BIOSORCIÓN DE CROMO (IV) EMPLEANDO LEVADURA SACHAROMYCES CEREVISIAE INMOVILIZADA SOBRE CÁSCARA DE CIDRA SECHIUM EDULE (JACO.) SW.

Vanessa, Flórez a*, Yula, M. Giraldo a, Clara, M. Mejía a.

^a Grupo de investigación Agroindustria de Frutas Tropicales, Universidad del Quindío, Colombia.
*Autor de correspondencia: <u>vflorezr@uqvirtual.edu.co</u>

Palabras Claves: Biosorción, retención, cromo, levadura y cáscara de cidra.

El uso de materiales de desecho ha despertado gran interés en el tratamiento de efluentes contaminados con metales pesados, por ello, en el presente trabajo se estudió la biosorción de cromo empleando levadura *Sacharomyces cerevisiae* inmovilizada sobre cáscara de cidra *Sechium edule*. Para ello, se prepararon tres formulaciones de levadura-cáscara de cidra (1:3; 1:1; 3:1) empleando levadura activada por lavado con ácido clorhídrico y, cáscara de cidra seca molida y tamizada. Las formulaciones fueron humedecidas agua destilada y sometidas a procesos consecutivos de agitación y secado. Para realizar los procesos de biosorción, se emplearon 2 g de cada formulación, con un volumen de 25 mL de solución de cromo VI, concentración de 25 ppm, tiempo de 2 horas con agitación de 100 rpm y pH de 5,7 manteniendo en todos los casos una temperatura de 25°C. Finalizados los tiempos de ensayo, el biosorbente fue retirado de la solución y analizado por espectroscopia infrarroja y microscopia de barrido electrónico; y las soluciones resultantes, fueron analizadas por espectroscopia de Absorción Atómica para determinar la concentración de cromo residual.

Aplicando un análisis estadístico simple, se encontró un porcentaje de retención de cromo de 82,16% con la proporción 1:3, de 76,12% con la proporción 1:1 y de 72,01% con la proporción 3:1 indicando que mayor proporción de cáscara de cidra favorece la retención del metal. Por otra parte, los espectros infrarrojos, permitieron identificar algunas bandas características de la levadura y la cáscara de cidra, que podrían estar participando en el proceso ya que se observaron cambios en la frecuencia y la intensidad de las bandas después del proceso de biosorción. De esta manera, se pudo demostrar la capacidad del biosorbente formulado para retener iones Cromo (VI); así mismo, que la cáscara de cidra (coproducto) tiene un alto potencial de estudio para el tratamiento aguas contaminadas.



EFECTO DE LA ADICIÓN DE HIDROCOLOIDES EN LA ELABORACIÓN DE ESPUMAS ALIMENTARIAS A BASE DE LULO Y PIMENTÓN

Alejandro Arboleda ^a, Andrés Forigua ^a, Cindy Camacho ^a, Alexander Gil ^a, Cristian C. Villa ^b, Leidy T. Sánchez ^{a*}.

^a Programa de Ingeniera de Alimentos. Facultad de Ciencias Agroindustriales. Universidad del Quindío.

Carrera 15, Calle 12 N.

b Programa de Química. Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías. Universidad del Quindío. Carrera 15, Calle 12 N.
* Autor de correspondencia: Itsanchez@uniquindio.edu.co

Palabras Claves: Estabilizante, espumas, hidrocoloides, pimentón, lulo.

Existe un creciente interés en el desarrollo de alimentos procesados que mantengan las características sensoriales de los alimentos naturales y que además sean resistentes a los procesos a los que normalmente son sometidos los alimentos. Es en este sentido que las espumas alimentarias se presentan como un campo novedoso para el diseño de nuevos productos en la industria alimentaria. Las espumas son sistemas dispersos termodinámicamente inestables, y por lo tanto fácilmente destruidos principalmente por procesos de coalescencia. En el presente proyecto de investigación se planteó la elaboración de espumas alimentarias a base de lulo y pimentón con adición de hidrocoloides como goma Xanthan, y carragenina, evaluando sus características físicas (estabilidad, color, reología) y fisicoquímicas (pH, °Brix, vitamina C, β–caroteno), para de esta forma establecer cual estabilizante ofrece las mejores condiciones prolongando el tiempo de vida útil de la espuma formulada. En cuanto a las propiedades fisicoquímicas, el pH y los °Brix, no presentaron una variación importante con respecto a la formulación, sin embargo, el contenido de vitamina C se vio afectado por el proceso de elaboración de la espuma, debido al daño mecánico al cual se someten las muestras para generar el sistema coloidal. La adición de estabilizante se tradujo en aumento de la estabilidad en el tiempo de la espuma, por disminución del tamaño de burbuja, tanto para el lulo como para el pimentón, evitando de esta forma, el proceso de drenado del sistema, en forma más marcada para el lulo, lo cual se evidencia en un aumento de la viscosidad del sistema, con un aumento en la concentración de hidrocoloide. En cuanto a las coordenadas del color, para el pimentón no se evidenciaron diferencias significativas durante el estudio, sin embargo para el lulo, se observaron cambios significativos en los parámetros L*, a* y b* debido al pardeamiento enzimático.





EVALUATION OF THE SYNTHESIS ROUTE OF NIO@CARBON **OUANTUM DOTS JANUS NANOCOMPOSITES ON THEIR PHOTO-**CATALYTIC PROPERTIES FOR ORGANIC MOLECULES DEGRADA-TION IN OIL/WATER EMULSIONS

D. Fabio Mercado a*, Luz M. Ballesteros a.

^a Centro de Investigaciones en Catálisis (@CICAT UIS), Parque Tecnológico Guatiguará (PTG) Universidad Industrial de Santander, Piedecuesta (Santander), Colombia. * Corresponding author: d.fabiomercado@gmail.com

Keywords: Janus nanocomposite; amphiphilic materials; heterogeneous photocatalyst; emulsions.

In this study, the photocatalytic performance of NiO doped Carbon Quantum Dots (NiO@CQD) amphiphilic nanocomposite for the degradation of organic molecules in oil/water emulsion was tested. Hydrothermal, sonochemical and microwave synthetic routes followed by a calcination step were used to obtain the NiO Core. In parallel, CQD were obtained from ethylene glycol by hydrothermal treatment. NiO@CQD nanocomposites were obtained by mixing the individual nanomaterials in water and them, this mixture was hydrothermally. The nanocomposite surface was selectively functionalized with different organic molecules to obtain Janus amphiphilic materials able to stabilize oil/ water emulsion. All the materials were characterized by TEM, XRD, DLS, XPS, TGA, N, adsorption/ desorption isotherms, ATR-IR and Raman spectroscopy, and the emulsion were characterized by optical microscopy and by z-sizer to measure the drop size.

The photodegradation tests of the organic molecule of interest in the oil/water emulsion were performed under UV/Vis light and followed by CG-GC in the oil phase, and by UV/Vis spectroscopy in both phases. Different degradation yields were achieved and any evident correlation of the physiochemistry properties of the materials and emulsions were evaluated.

IX SIMPOSIO DE QUÍMICA APLICADA (IX SIQUIA) Y I CONGRESO INTERNACIONAL DE NANOQUÍMICA, NANOFÍSICA Y NANOMEDICINA (I CINNN)

NITROGEN-DOPED CARBON QUANTUM DOTS SUPPORTED ON PA-RAMAGNETIC IRON-DOPED HYDROXYAPATITE NANOCOMPOSI-TES AS PHOTOCATALYST FOR DYE DEGRADATION IN AQUEOUS SOLUTION UNDER VISIBLE LIGHT

Laura A. Díaz a, Luz M. Ballesteros a, D. Fabio Mercado a.*.

a Centro de Investigaciones en Catálisis (@CICAT UIS), Parque Tecnológico Guatiguará (PTG) Universidad Industrial de Santander, Piedecuesta (Santander), Colombia. *Corresponding author: d.fabiomercado@gmail.com

Keywords: Nanocomposite; photocatalyst; degradation; hydroxyapatite; carbon quantum dots.

Paramagnetic iron-doped hydroxyapatite rod-like nanomaterials were decorated with Nitrogendoped Carbon Quantum Dots to obtain a material with both magnetic and photocatalytic properties. Different synthetic routes were used to obtain materials with different surface area and N-CQD relative surface concentration. The obtained materials were characterized by TEM, XRD, DLS, XPS, TGA, N₂ adsorption/desorption isotherms, ATR-IR and Raman spectroscopy. All techniques suggest the presence of only hydroxyapatite crystalline phase in the support.[1][2]

The obtained nanocomposite was used as heterogeneous photocatalyst for the degradation of organic dyes in aqueous solution. To elucidate the degradation mechanism, quenchers for specific reactive species such as HO, ¹O₂, O₃, h⁺ and e, were used [3] Different yields were obtained for each material and a possible mechanism was proposed.

- [1]. Mercado, D. F. et al. Paramagnetic Iron-Doped Hydroxyapatite Nanoparticles with Improved Metal Sorption Properties. A Bioorganic Substrates- Mediated Synthesis. ACS Appl. Mater. Interfaces **6**, 3937–3946 (2014).
- [2]. Mercado, D. F. et al. Versatile Fe-Containing Hydroxyapatite Nanomaterials as Efficient Substrates for Lead Ions Adsorption. J. Nanosci. Nanotechnol. 17, 9081–9090 (2017).
- [3]. Xie, Z. et al. Construction of carbon dots modified MoO₃/g-C₃N₄ Z-scheme photocatalyst with enhanced visible-light photocatalytic activity for the degradation of tetracycline. Appl. Catal. B Environ. 229, 96–104 (2018).



EVALUACIÓN DE LA ESTABILIDAD DE SISTEMAS ALMIDÓN-NANO-PARTÍCULAS DE PLATA, EFECTO DE DEL TIPO DE ALMIDÓN

Andrés F. Cruz-Posada ^a, Andrés F. Cañon-Ibarra ^a, M. Paola Sánchez-Castañeda ^a, Leidy T. Sánchez ^b, Cristian C. Villa ^{a*}.

^a Programa de Química. Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías. Universidad del Quindío.

Cra ¹⁵ Calle ¹² N. Armenia. Quindío. Colombia

^b Programa de Ingeniería de Alimentos. Facultad de Ciencias Agroindustriales. Universidad del Quindío.

Cra ¹⁵ Calle ¹² N. Armenia. Quindío. Colombia

* Autor de correspondencia: cevilla@uniquindio.edu.co

Palabras Claves: Nanopartículas de plata; almidón; estructura cristalina.

En los últimos años el desarrollo de la nanotecnología ha permitido avanzar en la formación de nanomateriales con diversas propiedades. Las nanopartículas de plata (AgNPs), aglomerados de átomos de plata que no superan los 100 nm en una de sus dimensiones, han mostrado una reconocida actividad antimicrobiana, por lo que se ha avanzado considerablemente en el desarrollo de diferentes métodos de síntesis y estabilización que sean amigables con el ambiente y amplíen su espectro de aplicación. Dentro de los medios más utilizados en la estabilización de las AgNPs de plata se encuentra el almidón, un sistema supramolecular formado por moléculas de glucosa y con una estructura semicristalina que depende de su origen botánico. En este trabajo, se estudió el efecto sobre las propiedades fisicoquímicas de las AgNPs de diferentes tipos de almidón (tipo A (maíz), tipo B (papa), tipo C (plátano)), mediante el método de óxido-reducción con glucosa. La caracterización de los sistemas almidón-AgNPs se realizó mediante espectroscopia UV-Vis, FTIR, difracción de rayos X y microscopia electrónica de transmisión (TEM). De los resultados obtenidos, se observó que la presencia del almidón aumenta considerablemente la estabilidad en el tiempo de las AgNPs, manteniendo la forma y la posición de la banda del plasmon superficial en el tiempo. De igual manera se observó que si existe un efecto de la estructura cristalina del almidón sobre el tamaño de las AgNPs, encontrándose que la forma C muestra un mayor tamaño que los otros dos tipos de almidón.

NANOCOMPOSITOS POLÍMERO-ORO: PREPARACIÓN, CARACTERIZACIÓN Y REMOCIÓN DE CONTAMINANTES

Paula A. Salazar^a, Juan P. Farias^a, María Angélica Rubio^a, Julio Sánchez^{a,*}.

Palabras Claves: Polímeros; remediación; nanocompositos; NPs Au.

El desarrollo industrial no solo ha llevado al crecimiento de un país, sino que también ha sido el principal causante de problemas medioambientales. Es por esto que es necesario nuevas tecnologías para la remediación de contaminantes que sean más eficientes, económicas y amigables con el medio ambiente.

En ese contexto, este proyecto de investigación se estudia la preparación, vía polimerización radicalaria del monómero cloruro de 2-metacroiloxietiltrimetil amonio (ClAETA), con entrecruzador N,N'-metilen bis-acrilamida y nanopartículas de oro. La caracterización se realizó a través de espectroscopia FTIR y microscopia SEM. Luego estos nanocompositos se utilizaron en la remoción de contaminantes como el cromo (Cr VI) presente en el agua.

En los resultados obtenidos se pudo apreciar que los nanocompositos polímero-oro tienen una coloración violeta grisácea homogénea en todo el hidrogel. La caracterización mediante FTIR muestra señales características del polímero P(ClAETA) y la microscopia SEM muestra el tamaño nanométrico de las nanopartículas de oro encapsuladas con el polímero. En cuanto a la remoción de cromato, el material nanocomposito P(ClAETA)-Au mejoró la capacidad de retención respecto al polímero P(ClAETA), puesto que, además de remover Cr (VI) de soluciones acuosas, al parecer logró reducir el contaminante a una especie más inocua que es el Cr(III). Adicionalmente, es posible separar fácilmente el cromo residual de la solución simplemente al retirar el nanocomposito del medio.

Debido a estos resultados, es posible proponer este material prometedor en el desarrollo de nuevas tecnologías para la remoción de contaminantes tan perjudiciales como el cromo en forma más eficiente y amigable con el medio ambiente.

Agradecimientos: Proyecto interno ayudantes de investigación año 2018, Departamento de Ciencias del Ambiente, Facultad de Ouímica y Biología, USACH. Provecto Fondecyt 1191336.

^a Departamento de Ciencias del Ambiente, Facultad de Química y Biología, Universidad de Santiago. Santiago, Chile * Autor de correspondencia: julio.sanchez@usach.cl



QUITOSANO FUNCIONALIZADO CON ÓXIDO DE GRAFENO PARA LA SÍNTESIS DE ANDAMIOS CON APLICACIÓN EN INGENIERÍA DE TEJIDOS

Ana M. Valencia a, Carlos D. Grande Tovar b*, Manuel N. Chaur a*, Carlos H. Valencia c, Gustavo Muñoz a.

^a SIMERQO, Universidad del Valle, Colombia

^b Grupo de investigación de fotoquímica y fotobiología, Universidad del Atlántico, Colombia

^c Biomateriales dentales, Universidad del Valle, Colombia

* Autor de correspondencia: <u>carlosgrande@mail.uniatlantico.edu.co</u>, <u>manuel.chaur@correounivalle.edu.co</u>

Palabras Claves: Ingeniería de tejidos; nanocompuestos; quitosano; óxido de grafeno

El objetivo de la medicina regenerativa es estimular la regeneración de tejidos y órganos que han sido afectados a causa del envejecimiento, enfermedades o traumas, en lo cual intervienen diferentes procesos bioquímicos que ocurren en el organismo a nivel celular. Para cumplir con su objetivo, la medicina regenerativa debe apoyarse en distintas áreas de la ciencia como la química, la ingeniería de materiales y disciplinas del área de la salud, con el fin de crear y utilizar nuevos materiales que sean biocompatibles y les brinden a las células no solo protección y apoyo, sino también un ambiente óptimo para que se favorezca el crecimiento celular.

El quitosano presenta numerosas ventajas en términos de biocompatibilidad y aplicación sobre otros polímeros. Sin embargo, para aplicaciones en regeneración celular como estructura tridimensional, presenta desventajas debido a su baja resistencia mecánica y alta afinidad por el agua, que disminuyen su eficacia como andamio. Por ello, se ha propuesto mezclarlo con otras especies como el ácido poliláctico, el fosfato de calcio y nanorellenos como el óxido de grafeno, con el fin de mejorar sus propiedades mecánicas.

Con este objetivo, se propuso funcionalizar el quitosano con el óxido de grafeno mediante la formación de una amida utilizando diciclohexilcarbodiimida y dimetilaminopiridina. El producto formado se lavó con agua, metanol y acetona para de eliminar los reactivos que no reaccionaron, se secó y posteriormente se preparó una lámina con el fin de implantar en un biomodelo para comprobar sus propiedades para regenerar tejido óseo. El producto obtenido posee las propiedades biológicas del quitosano y las propiedades mecánicas del óxido de grafeno, lo que le otorga mayor resistencia y soporte.

Como resultados preliminares se encontró mediante RAMAN las bandas correspondientes al óxido de grafeno y mediante un análisis FTIR se comprobó la formación de una amida correspondiente al enlace entre el quitosano y el óxido de grafeno. Esto indica que la reacción se dio de manera adecuada y se llevó a cabo la funcionalización de estos dos productos.

RECUBRIMIENTOS ANTICORROSIVOS HÍBRIDOS ORGÁNICO -INORGÁNICO DE SIO, PRODUCIDOS VÍA SOL - GEL

Camila A. Lota a, Yehidi J. Medina a, Diego A. Castiblanco a, Hernando A. Jiménez a, Rolando J. Rincón a, Daniel Llamosa a*.

> ^a Universidad Antonio Nariño, Bogotá D. C., Colombia * Autor de correspondencia: dllamosa@uan.edu.co

Palabras Claves: Nanomateriales, sol-gel, recubrimientos, anticorrosivos, acero, dióxido de silicio

Los nanomateriales son materiales con propiedades diferenciadas incluso de materiales con la misma composición a escala macroscópica.

En este contexto, se ha desarrollado un óxido de silicio a escala nanométrica aplicado sobre la superficie de aceros para así prevenir su corrosión. El acero es uno de los materiales tecnológicos más empleado durante los últimos dos siglos. La corrosión produce una degradación progresiva de esta tipología de materiales, que dado su costo y la necesidad inherente de mantener sus propiedades técnicas y tecnológicas merecen la exploración de metodologías alternativas para su protección. Dentro de los métodos de síntesis para la producción de materiales, la metodología sol-gel asistida por ultrasonidos, se establece como una ruta prometedora, que tras un tratamiento térmico permite la obtención de recubrimientos cerámicos que actúan como barreras físicas frente a los procesos de corrosión, con la posibilidad de aplicar los mismos sobre sustratos con formas complejas, si se acompaña de técnicas por inmersión.

El presente trabajo presenta la síntesis híbrida, caracterización y evaluación de recubrimientos de SiO₂ producidos por una ruta sol-gel catalizada por ácidos y asistida por ultrasonido. Para ello se emplearon dos tipos de precursores: el tetraetoxisilano (TEOS) como precursor inorgánico y el metiltrietoxisilano (MTES) como precursor orgánico. La síntesis se realizó bajo diferentes condiciones experimentales de polimerización, tales como pH, radio de hidrólisis y modificadores de red. Para probar el nanomaterial preparado, se emplearon como sustratos probetas de acero cold rolled (Norma ASTM A424). Los recubrimientos se produjeron por inmersión (dip-coating). Las muestras fueron caracterizadas a través de microscopia electrónica de barrido (MEB), espectroscopia de energía dispersa (EED), microscopía de fuerza atómica (AFM) y espectroscopía de impedancia electroquímica (EIE). Los resultados obtenidos demostraron la factibilidad de producir un material nanoestructurado que posterior a su aplicación producirá una capa delgada con la posibilidad de proteger el material de interés de la corrosión, sin afectar su aspecto físico.



NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS MODIFICADAS CON ÁCIDO TÁ-NICO COMO ADSORBENTE DE CADMIO(II) EN MEDIO ACUOSO

Camilo E. García a, Anderson Guarnizo a*, Ximena C. Pulido a.

a Grupo de Investigación de Química Aplicada a Procesos Ecológicos (QUAPE), Departamento de Química Universidad del Tolima, Colombia

* Autor de correspondencia: aguarnizof@ut.edu.co

Palabras Claves: Biosorbente; biofuncionalización, descontaminación, magnetita, metales pesados.

La contaminación de fuentes hídricas con metales pesados de origen antropogénico es una amenaza para la salud ambiental y humana por la reconocida toxicidad de estas sustancias, muchas tecnologías de remediación han sido aplicadas: filtración, centrifugación, precipitación, coagulación, oxidación, extracción, intercambio iónico y adsorción principalmente, este último, es uno de los preferidos por su simplicidad y versatilidad, y está basado en la habilidad de ciertos sólidos para concentrar preferencialmente sustancias específicas en su superficie, tales como los metales pesados, en la última década se han estudiado las nanopartículas de magnetita (MNPs) como una opción sustentable para procesos químicos más verdes. Dado su tamaño nanométrico y propiedades magnéticas, las MNPs tienen un área superficial elevada en relación a su volumen y pueden ser recuperadas fácilmente mediante el uso de un campo magnético externo, lo cual mejora las posibilidades para su reutilización. En esta investigación se sintetizó, se caracterizó y se usó un adsorbente híbrido de nanopartículas modificadas con ácido tánico, para el tratamiento de disoluciones acuosas de Cd2+. Para esto se sintetizaron nanopartículas de magnetita por método de precipitación de sales y posteriormente se trataron con una disolución de ácido tánico bajo ultrasonido, la apariencia y el tamaño de partícula se determinó mediante SEM, TEM y DLS. Con FTIR, espectrometría de masas MALDI – TOF y TGA se demostró la presencia de ácido tánico en el material. Las nanopartículas obtenidas se utilizaron para adsorber cadmio en medio acuoso, la adsorción fue dependiente del pH, logró un porcentaje de hasta 45% en una solución con concentración inicial de iones de cadmio de 30 ppm, empleando 30 mg de adsorbente. Las MNPs modificadas con ácido tánico demostraron ser eficientes para la adsorción de cadmio, lo cual implica potenciales aplicaciones promisorias en la descontaminación de aguas.

ESTUDIO SOBRE LA CARACTERIZACIÓN ELÉCTRICA DE UNA MEMBRANA DE INTERCAMBIO PROTÓNICO COMPUESTA POR POLIACETATO DE VINILO (PVAC) Y ACIDO HIPOFOSFOROSO (H,PO,) USADA EN UNA CELDA COMBUSTIBLE

C. A. Cabrera a*, V. H. Zapata A, M. Buendia A.

^a Grupo de Óxidos Avanzados, Universidad Nacional de Colombia campus Medellín, Colombia.
* Autor de correspondencia: cacabreraa@unal.edu.co

Palabras Claves: Poliacetato de vinilo; ácido hipofosforoso.

Se preparó una membrana de intercambio protónico compuesta por poliacetato de vinilo (PVAc) y ácido hipofosforoso (H_3PO_2) con concentración molar OH/P: 0,20 a la cual se le hizo un estudio de caracterización eléctrica con un equipo de impedancia compleja realizando un barrido de frecuencia desde 42Hz hasta 1MHz. El rango de temperatura aplicado al sistema de medición fue desde 25°C hasta 50°C, y cuya dinámica del ion H⁺ depende de las temperaturas de transición vítrea Tg, y fusión Tm del polímero. Los resultados obtenidos mediante el uso de esta técnica muestra que los valores de resistencia disminuyen a medida que hay un aumento en la temperatura, obteniéndose valores en el rango de 1Ω y 3Ω , siendo estos valores favorables para su aplicación en una celda combustible debido al aumento de los iones H⁺ en la membrana por el efecto de la adición del ácido. Luego de realizar el ajuste y análisis de datos, se logró determinar que la energía de activación de los iones H⁺ es de 80.3 MeV*K⁻¹, lo que indica la facilidad de movimiento de los iones.



ESTUDIO EXPERIMENTAL DEL EFECTO DEL INDIO SOBRE EL SISTEMA DE FE₃SN

C. A. Palchucán a*, L. E. Zamora a, G. A. Pérez Alcázar a, J. A. Tabares a.

a Departamento de Física, Universidad del Valle, Colombia * Autor de correspondencia: carlos.palchucan@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Imanes permanentes; ferromagnetismo; magnetismo; materiales magnéticos.

En este trabajo, se reporta el estudio de las propiedades magnéticas intrínsecas, tales como la magnetización de saturación Ms, la magnetización remanente Mr y el campo coercitivo Hc del sistema Fe₃Sn dopado con In, además se buscó obtener la fase pura Fe₃Sn. El Fe₃Sn es un sistema promisorio como imán permanente debido a su alta anisotropía magnética. Las muestras de Fe₃Sn₁x Inx con 0.00≤x≤0.20 se prepararon por distintos métodos con el objetivo de investigar la forma idónea de preparación y así obtener los mejores resultados. Los métodos fueron: 1) por una reacción de estado sólido (1-RES) con un tratamiento térmico, 2) por dos reacciones de estado sólido (2-RES) con dos tratamientos térmico, 3) por arc melting y por 4) melt spinning. Estas muestras fueron caracterizadas mediante magnetización de muestras vibrante (VSM), difracción de rayos X (DRX) y espectroscopia Mössbauer (EM). El análisis de VSM mostró que los valores más altos para Ms, Mr y Hc son para la muestra con x = 0.00 y 2-RES, donde Ms = 133 Am²/kg, Mr = 2.55 Am²/kg y Hc = 5.19 mT. Los patrones de DRX de todas las muestras se ajustaron con las fases hexagonales: Fe₃Sn, Fe₂Sn, FeSn₂, FeSn, In₀₂Sn₀s y la fase cúbica Fe₁s₄Sn₀₁6. Además, con este análisis estructural se muestra que la fase Fe₃Sn presente en Fe₃Sn₁x Inx con x=0.00 obtenida por 2-RES es aproximadamente un 90% de fase monocristalina. Los espectros Mössbauer para las muestras se ajustaron con sextetos asociados a las fases ferromagnéticas tales como: Fe₃Sn, Fe₃Sn₂, FeSn₂, FeSn₂ , FeSn₂ y Fe₁s₄Sn₀₁6.

Después de analizar los resultados se concluye que la forma más idónea de preparación es por 2-RES. Debido a esto estas muestras fueron seleccionadas para realizarles microscopia electrónica de barrido (SEM), análisis termomagnético (TGM) y medidas de campo de anisotropía (Ha). Las medidas SEM mostraron que la morfología de las partículas no es homogénea y que el tamaño de partícula promedio de cada muestra crece conforme aumenta el dopaje de In. El análisis TGM mostró que las muestras tienen un gran porcentaje de faces ferromagnéticas como: Fe₃Sn y Fe_{1.84}Sn_{0.16}, lo cual concuerda con los análisis y ajuste de EM.

ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y MAGNÉTICAS DEL SISTEMA $PR_{1-X}SR_XMNO_3$ (0.1 $\leq X \leq 5$) OBTENIDAS A PARTIR DEL MÉTODO DE PRECURSOR POLIMÉRICO

Carol J. Aguilar a*, Jesús E. Diosa a, b, Eval J. Baca a, Gilberto Bolaños c, Jorge E. Rodríguez c. ^a Departamento de Física, Universidad del Valle, Colombia ^b Centro de Excelencia en Nuevos Materiales (CENM, A.A. ²⁵³⁶⁰, Cali, Colombia ^c Departamento de Física, Universidad del Cauca, Colombia * Corresponding author: carol.aguilar@correounivalle.edu.co

Keywords: Manganites; synthesis method; polymeric precursor method; magnetic properties

Manganese compounds, known as manganites, are one of the most intensely studied condensed matter systems in recent years. These materials are magnetically and electrically important as a ferromagnetic material and as a mixed conductor. In this work were obtained ceramic powders of the Pr. Sr. MnO₃, system - manganites of praseodymium doped with strontium materials. The synthesis process used to obtain these powders was the polymeric complex method (Pechini) and the nanoparticles were obtained at 900 °C. Their structural properties were determined using X-ray diffraction (XRD) and Scanning Electron Microscope (SEM). The lattice parameters were measurements at room temperature using X-ray diffraction information. The primary particle size was <100 nm. The Rietveld refinement of X-ray diffraction patterns confirms the single-phase composition with orthorhombic (Pbnm) perovskite symmetry. The magnetization measurements revealed the paramagnetic to ferromagnetic transition temperature (T_a) increased with Sr doping. The magnetic properties of Pr_a Sr MnO₃ samples could be explained on the basis of a double exchange mechanism between pairs of $\hat{M}\hat{M}^{3+}$ and \hat{M}^{4+} ions. These properties are strongly dependent on the ratio of $\hat{M}^{3+}/\hat{M}^{4+}$.



EFECTO DEL QUITOSANO DE BAJO Y MEDIO PESO MOLECULAR EN LA OBTENCIÓN DE NANOPARTÍCULAS METÁLICAS ESTABLES

Elisa Hernández ^a, Yuliet Montoya ^{a,*}, Wilson Agudelo ^a, John Bustamante ^a

^a Grupo de Dinámica Cardiovascular, Centro de Bioingeniería, Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín, Colombia * Autor de correspondencia: yuliet.montoya@upb.eu.co

Palabras Claves: Peso molecular; quitosano; síntesis verde; nanopartículas metálicas; estabilidad coloidal

El uso del quitosano de diversos pesos moleculares como agente reductor y estabilizante de nanopartículas metálicas, ha sido implementado para el estudio de nanoestructuras estables con características químicas, que posibiliten su implementación en aplicaciones biomédicas donde se evalúe su respuesta biocompatible y su estabilidad coloidal.

En este trabajo se determinó el tamaño, morfología y composición de nanopartículas de oro y plata, evaluando la influencia del peso molecular del agente reductor en la formación de nanomateriales, con el fin de comparar el efecto del peso molecular del guitosano con la estabilidad coloidal y el tamaño de partícula. Se sintetizaron nanopartículas de oro y plata empleando como agente reductor quitosano de bajo y medio peso molecular y fueron caracterizadas mediante espectroscopia de luz visible (UV-Vis) y microscopía electrónica de transmisión de barrido (STEM). Así mismo, se realizó un seguimiento de la estabilidad coloidal por medio de UV-Vis y registro fotográfico durante seis semanas.

Se evidenció un comportamiento inversamente proporcional en el tamaño de las nanopartículas de plata en relación con el peso molecular del quitosano, obteniéndose tamaños de partícula de 15 ± 1.7 y 4.5 ± 1.2 nm con el guitosano de bajo y medio peso molecular, respectivamente. Por el contrario, las nanopartículas de oro presentaron un comportamiento directamente proporcional al obtenerse diámetros de partícula de 8 ± 1.3 y 11 ± 1.4 nm conforme se aumentó el peso molecular del quitosano. Además, se obtuvo la resonancia del plasmón a 424 y 430 nm para las nanopartículas de plata con quitosano de bajo y medio peso molecular y para las nanopartículas de oro, se evidenció un plasmón a 520 nm para los dos tipos de quitosano.

Se obtuvieron nanopartículas metálicas estables con morfología esférica empleando un polisacárido de origen natural, como agente reductor y estabilizante. Además, se evidenció el efecto en la polidispersión y el tamaño de partícula dependiendo del ión metálico al emplear quitosano de bajo y medio peso molecular, así mismo, se presentó una mayor variación de la banda de absorción durante las seis semanas posteriores a la síntesis para el quitosano de bajo peso molecular.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE UNA NUEVA BISHIDRAZONA DE FLUORESCEÍNA Y SUS COMPLEJOS CON ZN²⁺: ESTUDIO COMPARATIVO DE SUS ESPECTROS DE EMISIÓN Y ABSORCIÓN

Miller A. Erazo Bernal a,b, Jorge I. Castro Castro a, Cesar A. Mujica-Martínez b, Manuel N. Chaur Valencia a*. ^a Síntesis y Mecanismos de Reacción en Química Orgánica – SIMERQO, Departamento de Química,

Universidad del Valle, Colombia

^b Grupo de Investigación en Fisicoquímica Básica y Aplicada – GIFBA, Departamento de Química, Universidad de Nariño, Colombia

* Autor de correspondencia: manuel.chaur@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Complejos supramoleculares; metalo-rejillas; fluorescencia; rendimiento cuántico.

Los complejos de coordinación supramoleculares han cobrado gran relevancia como nanomateriales debido a la modulación de sus propiedades frente a estímulos externos como pH y temperatura, teniendo posibles aplicaciones en dispositivos para el procesamiento de la información. El presente trabajo presenta la síntesis de un nuevo ligante bis-hidrazónico derivado de fluoresceína para la posible obtención de métalo-rejillas 2x2, las cuales, fueron obtenidas a través de una reacción de complejación del ligante bis-hidrazónico con iones metálicos de zinc(II). La caracterización de todos los compuestos se realizó mediante espectroscopia de RMN (¹H, ¹³C, COSY, HMBC). En particular, se realizó un estudio del efecto solvatocrómico, evaluando las propiedades foto-físicas de los compuestos obtenidos usando espectroscopia UV-vis y de fluorescencia, la posición de los máximos de emisión se ve modificada en función del disolvente, dichos desplazamientos producidos están relacionados con el diferente grado de solvatación de las moléculas en estado excitado según la polaridad del medio. En este trabajo de investigación se reportan los rendimientos cuánticos de cada precursor por medio de la caracterización electrónica como función del proceso de solvatación (disolvente) del nuevo sistema de cargas separadas. Los resultados indican que los compuestos obtenidos tienen potencial aplicación como quimio-sensores o como interruptores opto-electrónicos.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE MEMBRANAS A BASE DE SILICALITA Y POLIDIMETILSILOXANO

Erick F. Alfonso a*, Jairo A. Cubillos a, Jorge A. Moreno a.

^a Grupo de Catálisis, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Colombia. * Autor de correspondencia: erick.f.alfonso@gmail.com

Palabras Claves: Pervaporación; membrana; nanocristal; biocombustible; caracterización.

La búsqueda de alternativas económicas y eficientes al hablar de combustibles ha dejado campo abierto para desarrollar procesos que pretendan reducir el impacto ambiental generado no sólo por el uso de combustibles fósiles, sino también el causado por obtenerlos. La pervaporación se ha presentado como una gran estrategia a la hora de producir alternativas para la obtención y purificación de una gran cantidad de productos haciendo uso de membranas selectivas, uno de estos productos es una de las alternativas más prometedoras en cuanto a biocombustibles se refiere: el butanol, menos higroscópico y con un poder energético mayor bajo combustión (5265 KJ/mol frente a 2773.6 KJ/ mol del etanol). Así, alcoholes como el butanol y el etanol producidos por microorganismos a partir de melaza, almidón o inclusive residuos agrícolas, podrían fácilmente en un futuro reemplazar a los combustibles de origen fósil, sin modificar los automóviles existentes o en producción.

El presente trabajo está dirigido a la preparación y caracterización de membranas para la separación de la mezcla acuosa compuesta por acetona, butanol y etanol (ABE) utilizando la técnica de la pervaporación. Las principales técnicas de síntesis usadas son métodos de siembra y crecimiento hidrotermales y síntesis por spin coating. La dificultad al preparar membranas gira en torno a la estabilidad mecánica, física y química que se tiene al momento de realizar la separación y las cuales son resultado directo de pequeñas variaciones en los métodos de síntesis.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE UN RECUBRIMIENTO COMERCIAL FUNCIONALIZADO CON ÓXIDO DE GRAFENO

Iván F. Izaquita a*, Iván D. Gómez a, Enrique Mejía a, Rafael Cabanzo a.

a Laboratorio de espectroscopia atómica y molecular LEAM. Centro de materiales y nanotecnología. Universidad Industrial de Santander. Colombia

* Autor de correspondencia: <u>ivanfelipediazizaquita@gmail.com</u>

Palabras Claves: Resina epoxi; óxido de grafeno; recubrimientos, corrosión.

La investigación constante y los avances introducidos en el desarrollo de mecanismos en la lucha contra la corrosión comprende la exploración e incorporación de nuevos materiales para reforzar los recubrimientos convencionales, procurando obtener sistemas anticorrosivos con un mejor desempeño que sean de gran interés para la industria en general. En los últimos años, el empleo de nanomateriales a base de carbono como el óxido de grafeno (GO) ha tenido gran auge debido a las excepcionales propiedades fisicoquímicas que se derivan de su estructura.

En este trabajo, se reforzó un recubrimiento epoxi incorporando óxido de grafeno en el polímero mediante el uso apropiado de algunos disolventes orgánicos. Los recubrimientos obtenidos se caracterizaron realizando un mapeo con espectroscopia Raman para estudiar la dispersión del óxido de grafeno en la matriz polimérica. Los resultados de los análisis de termogravimetría (TGA) y calorimetría diferencial de barrido (DSC), dan indicio del efecto sinérgico existente entre los dos materiales, ya que algunos de los recubrimientos presentaron mejoras notables en su estabilidad térmica. Los diferentes recubrimientos también se estudiaron a través de otras técnicas espectroscópicas como infrarroja y microscopia electrónica de barrido, con el propósito de conocer aspectos estructurales que permitieran comprender con mayor detalle la forma como el óxido de grafeno contribuye al mejoramiento de las propiedades de estos recubrimientos.



MODIFICACIÓN DE LA POROSIDAD EN AEROGELES DE ÓXIDO DE GRAFENO MEDIANTE DECORADO CON NANOPARTÍCULAS DE TURMALINA

Heltmuth R. Vega a, Jordy S. Mayorga a, Sergio A. Lesmes a, Rafael Cabanzo a,*, Enrique Mejía a.

^a Laboratorio de Espectroscopía Atómica y Molecular (LEAM), Universidad Industrial de Santander, Colombia * Autor de correspondencia: rcabanzo@uis.edu.co

Palabras Claves: Turmalina; óxido de Grafeno; aerogel; adsorción.

Los aerogeles de óxido de grafeno presentan potenciales aplicaciones debido a su alta porosidad, baja densidad y variada morfología, lo que promueve el rápido transporte de masa y electrones. Sin embargo, en aplicaciones de adsorción se hace necesario evitar la repulsión entre láminas de grafeno generadas principalmente por las interacciones π - π stacking de los anillos aromáticos. Por lo anterior, en el presente trabajo se propone un método novedoso para preparar un aerogel de óxido de grafeno/ turmalina mediante reducción – congelación. Al respecto, se obtuvo que las nanopartículas de turmalina adicionadas promovieron el apilamiento de las hojas de grafeno reduciendo la repulsión por efecto de los iones negativos de esta y aumentando su porosidad. Los resultados muestran que se logra mejorar la adsorción de las estructuras de óxido grafeno hasta en un 10%. Basta agregar que los aerogeles se caracterizaron mediante microscopía electrónica de barrido (SEM), difracción de rayos X (DRX), RAMAN, adsorción-desorción de nitrógeno, FTIR-ATR y UV-Vis.

RUTA DE OBTENCIÓN DEL COMPUESTO HELIMAGNÉTICO TIPO PEROVSKITA SRFEO_{3-X} ORIENTADO HACIA ESTUDIOS DE TRANSPORTE ESPINTRÓNICO

José. L. Valenzuela a*, Ligia. E. Zamora a, Germán. A. Pérez a, Ruby. R. Rodríguez b.

^a Metalurgia física y teoría de transiciones de fase, Universidad del valle, Colombia

^b Universidad Autónoma del Occidente

* Autor de correspondencia: josevalenzuela3146@gmail.co

Palabras Claves: Espintronica; magnetorresistencia; selección de espin; magnetotransporte.

La habilidad de manipulación de los estados de los espines electrónicos ha llevado a grandes avances tecnológicos, principalmente en la capacidad de almacenamiento y transferencia de información. Para este fin se han usado materiales nanoestructurados fabricados con diferentes configuraciones que son capaces de hacer una selección de estados de espines (SEE). El principal obstáculo de este tipo de materiales es el tamaño por ser un diseño artificial. Sin embargo, existen materiales, generalmente óxidos, que por naturaleza tienen la propiedad de SEE y podrían reemplazar a los materiales estructurados y diseñados por el hombre. Pero para que su aplicación sea viable se necesita entender claramente el origen de la naturaleza de la SEE de estos materiales. El objetivo de este trabajo fue producir un material que posea la capacidad SEE para, en un futuro, usarlo como herramienta de trabajo en el estudio de este fenómeno. La perovskita SrFeO3-x posee diversos grados de magnetorresistencia como mecanismo en la SEE, fenómeno que es relacionado a su estructura helimagnética en temperaturas por debajo de los 130 K. Al ser este un óxido cerámico, su obtención comúnmente se lleva a cabo bajo presiones y temperaturas superiores a 1000 C, condiciones que debilitan su viabilidad aplicativa. Sin embargo, nosotros proponemos rutas que conllevan a la formación del compuesto en polvo a temperaturas no mayores a 700 C y posteriormente demostramos que usando estas rutas, métodos químicos y spin-coating como método de deposición, se pueden fabricar películas delgadas sobre sustratos de silicio que debido a la disminución de temperaturas se evita una alta difusión de este hacia la película de perovskita. El producto en polvo fue caracterizado estructuralmente usando difracción de rayos-X en configuración Bragg-Brentano, mientras que por medio de espectroscopía Mossbaüer se encontró las propiedades hiperfinas de los núcleos de hierro en este tipo de muestras. Por otro lado, la estructura cristalina de las películas delgadas también fue caracterizadas por medio de difracción de rayos-X, pero esta vez con una configuración de haz rasante. Usando las oscilaciones de Kiessig obtenidas mediante reflectometría de rayos-X se determinó el espesor de cada una de las películas y a su vez permitiendo evidenciar un patrón de crecimiento en cada deposición.



SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN FISICOQUÍMICA Y PROPIEDADES PIEZORESISTIVAS DE UN ELASTÓMERO BASADO EN POLIDIMETILSILOXANO MODIFICADO CON NANOPARTÍCULAS **DE PLATA**

Andrés F Cruz a, Juliana N Sierra a*, Jairo A Gómez a, Carlos A Parra a, Leonel J Paredes b. ^a Grupo de física de materiales, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Colombia. ^b Facultad de Ingeniería Mecánica, Electrónica y Biomédica, Universidad Antonio Nariño, Colombia. * Autor de correspondencia: juliana.sierra@uptc.edu.co

Palabras Claves: Ag/PVP; síntesis coloidal; piezoresistivo; nanomateriales.

En las últimas décadas, la producción de polímeros conductores con aplicabilidad práctica en diversos sectores ha crecido de forma notable, toda vez que supone una reducción en los costos asociados a la utilización y el empleo de materiales conductores y semiconductores, favoreciendo el crecimiento de esta industria y reduciendo los efectos contaminantes que supone la utilización de conductores de fase metálica y oxídica. En este sentido, el crecimiento de esta tecnología se ha mantenido desde hace algunas décadas soportado sobre la base del desarrollo de polímeros de polianilinas, policetonas y del tipo poliimidas, siendo estas últimas las más estables y con niveles de conductividad representativos. En este contexto la búsqueda de materiales semiconductores con un band gap reducido que permitan ser utilizados en diversas aplicaciones tecnológicas se ha convertido en uno de los principales desafíos de la ciencia de materiales y de la industria electrónica para los próximos años, y aunque los primeros avances en este campo se han orientado desde hace tiempo al perfeccionamiento de las polianilinas (PANI), debido a que presentan ciertos niveles de estabilidad y un reducido band gap. Algunas desventajas tales como las bajas temperaturas de síntesis asociadas al proceso de polimerización y los bajos rendimientos, han reducido su potencial aplicabilidad; haciendo evidente la necesidad de nuevos materiales, que además de cumplir todas las condiciones establecidas para estos, permitan mejorar el rendimiento de diversos dispositivos electrónicos basados en estas tecnologías.

Basados en las consideraciones previas y con el objetivo de aportar conocimientos en el diseño y construcción de materiales conductores avanzados para potenciales aplicaciones electrónicas, encaminadas al diseño de sensores inteligentes, particularmente de sensores piezoresistivos, este proyecto se focaliza en la síntesis, caracterización y potencial aplicabilidad de nanopartículas de Ag/PVP, empleando una ruta de síntesis coloidal que permita incorporar nanopartículas de plata en diversas concentraciones porcentuales que mejoren la respuesta del sistema bajo cargas dinámicas.

CARBON NANOTUBES AND GRAPHENE PROMOTE PYROLYSIS OF FREE-BASE PHTHALOCYANINE

Lina M. Bolívar a*, Vladimir E. Basiuk a, Victor H. M. a, Elena V. Rybak b, Elena V. Basiuk c. a Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, México ^b Department of Chemistry- Tufts University, United States ^e Instituto de Ciencias Aplicadas y Tecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, México * Corresponding author: linabolivar12@gmail.com

Keywords: Free-base phthalocyanine; pyrolysis; carbon nanotubes; graphene; phthalonitrile

The possible noncovalent functionalization of pristine single-walled carbon nanotubes (SWCNTs) with free-base phthalocyanine H₂Pc was proposed by following the sublimation protocol, used for nanotube functionalization with unsubstituted metal phthalocyanine complexes. While we found the preparation of target SWCNTs+H₂Pc hybrid to be generally affordable, a highly undesirable side effect of partial H₂Pc pyrolysis was detected under stability conditions. One of the main decomposition products is phthalonitrile, as identified by Fourier-transform infrared and Raman spectroscopy. The yield of phthalonitrile is roughly of the order of 1%, whereas the estimates of how much phthalocyanine remained undecomposed gave 77-79%. The experiments with H₂Pc sublimation in the presence of pristine multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs) and graphene were performed, getting the yield of phthalonitrile of 5% and 1%, and the degree of phthalocyanine preservation of about 64% and 76%, respectively, on order to compare. To explanation of the physico-chemical phenomena which could cause H₂Pc pyrolysis, we employed theoretical calculations (Density functional theory and molecular mechanics). We found that even though H.Pc molecule undergoes bending distortion upon physical adsorption on cylindrical SWCNT sidewalls, this distortion causes an increase in the energy of phthalocyanine macrocycle which is insufficient to provoke its thermal decomposition. Besides that, the curvature effect cannot explain H₂Pc pyrolysis in the presence of MWCNTs and especially graphene, whose surface is essentially flat. The phenomenon which was concluded to be a more likely explanation for the thermal behavior of H₂Pc is based on its covalent attachment to the topological defects, which contain pentagonal rings, are very common in all graphite-derived carbon nanomaterials and capable of reacting with amines via nucleophilic addition process.



PERFORMANCE ENHANCEMENT OF AL/CUO NANOLAMINATES BY INCORPORATION OF CU AND ZNO NANOLAYERS AT THE INTERFACES

Lorena Marín a,b*, Bénédicte Warot-Fonrose c, A. Estève d, and C. Rossi d.

^a Grupo de Películas Delgadas, Departamento de Física, Universidad del Valle, Colombia.
^b Centro de Excelencia en Nuevos Materiales – CENM, Universidad del Valle
^c CEMES-CNRS UPR ⁸⁰¹¹, Univ. Toulouse, F-³¹⁰⁵⁵ Toulouse, France
^d LAAS-CNRS, ⁷ Avenue du colonel Roche, F-³¹⁰⁷⁷ Toulouse, France
*Corresponding author: marin.lorena@correounivalle.edu.co

keywords: Nanolaminates; self-propagating reaction; Al/CuO; Al/Cu; ZnO

Reactive nanolaminates are stacked nanolayers of metal and oxide that undergo exothermic, selfpropagating reactions when layer mixing is induced by an external energy source. These materials are of growing interest as customized heat and gas sources for materials, chemical, and biochemical communities. They can be easily integrated within microscale devices to address various potential applications as micro-thermal sources, micro-actuators, in-situ welding, local enhancement of chemical reactions, nano-sterilization and controlled cell apoptosis. We present here a DC-magnetron sputtering process to engineer Al/CuO nanolaminates. In all cases the layers have uniform thicknesses that are separated by atomically resolved interfacial regions [1,2]. We explore a novel method for enhancing the reactivity of Al/CuO nanolaminates and uses a combination of structural and chemical characterization techniques to uncover the fundamental mechanism responsible for this enhancement. Considering 7 bilayers Al/CuO nanolaminates, we show that the deposition of only 5 nm of metallic Cu on the 100 nm thick Al layer prior to the deposition of the 200 nm thick CuO layers, leads to an increase of the flame propagation velocity by a factor of 1.6. In addition, we demonstrate that the ALD deposition of a thin ZnO layer on the CuO prior to Al deposition leads to a substantial increase in the efficiency of the overall reaction. These results represent a substantial contribution to the field of Al-based thin film community by bringing not only a new method to optimize devices but also a fundamental mechanistic understanding of the mechanism that control of the properties of these materials.

- [1] L. Marín, et al, ACS Appl. Mater. Interfaces 2015, 7, 11713
- [2] J. Kwon, et al, ACS Appl. Mater. Interfaces 2013, 5, 605

IX SIMPOSIO DE QUÍMICA APLICADA (IX SIQUIA) Y I CONGRESO INTERNACIONAL DE NANOQUÍMICA, NANOFÍSICA Y NANOMEDICINA (I CINNN)

EFECTO DE LA APLICACIÓN DE LOS CAMPOS MAGNÉTICOS SOBRE LAS PROPIEDADES ELÉCTRICAS DEL SISTEMA DE PVOH + CO,O, MEDIANTE EL USO DE ESPECTROSCOPIA DE IMPEDANCIA COMPLEJA (IS) A ALTAS TEMPERATURAS

Melisa Buendía a*, Víctor H. Zapata b, Wilmer J. Saldarriaga c.

^{a, b} Grupo de óxidos avanzados, Universidad Nacional de Colombia sede Medellín, Colombia ^e Grupo de cerámicos y vítreos, Universidad Nacional de Colombia sede Medellín, Colombia * Autor de correspondencia: mbuendiat@unal.edu.co

Palabras Claves: Impedancia compleja; oxido de cobalto; campo magnético; magneto impedancia; espectroscopia.

Se prepararon muestras de PVOH + Co₃O₄, con concentración de 1% de Oxido de Cobalto. Los estudios de caracterización eléctrica de las muestras fueron realizados mediante el uso de la técnica de espectroscopia de impedancia compleja (IS) aplicando un campo magnético constante B de 1000 Gauss, perpendicular al campo eléctrico E de la técnica IS, con diferentes temperaturas entre 80 y 180 °C. Los resultados muestran que existe una energía de enlace débil entre los iones de Co³⁺ y su entorno, la cual disminuyó con la aplicación del campo B favoreciendo la movilidad iónica en la membrana y encontrando valores más altos en la conductividad del orden de 10⁻²-10⁻³ S/cm. Mediante ajustes usando el modelo Arrhenius y obteniendo energías de activación del orden de 1 eV para el ion de cobalto Co³⁺.

Se usaron barridos en frecuencia de 42 Hz a 1 MHz en la técnica IS y se observaron dos semicírculos en el diagrama de nyquist permitiendo el ajuste y análisis de datos mediante el uso de dos circuitos R-CPE encontrando valores de capacitancia del orden de 1 nF, atribuyendo este comportamiento a efectos en la frontera y centro de grano de las partículas de óxido en la matriz polimérica.



ESTUDIO DE LA ESTRUCTURA DE BANDAS A TRAVÉS DE XPS DE PELÍCULAS DELGADAS DE SNO₂ DEPOSITADAS POR ALD: COMPATIBILIDAD COMO CAPA TRANSPORTADORA DE ELECTRONES EN CELDAS SOLARES

Marcelo A. Martínez a*, Gerardo Silva a, Eduardo Martínez a.

^a Centro de Investigación en Materiales Avanzados S.C. Unidad Monterrey, México * Autor de correspondencia: marcelo.martinez@cimav.edu.mx

Palabras Claves: ALD; PEALD; estructura electrónica; SnO₂; celdas solares

El SnO₂ es un buen candidato para utilizarse como capa transportadora de electrones en la estructura de celdas solares basadas en perovskitas hibridas MAPbX, esto debido a que presenta una excelente compatibilidad de la heterounión debido al acoplamiento de las bandas de conducción y valencia de estos materiales, además la conductividad del SnO₂ es de 3x10² S cm⁻¹ y una presenta una tasa de transmisión de vapor del orden de 10⁻⁶ g (m² día)⁻¹, estando en el orden de magnitud que se exige en el encapsulado de OLED¹. Para el estudio de la modificación de la estructura de bandas, se utilizaron diferentes condiciones de depósito por medio de Atomic Layer Deposition (ALD) y Plasma Enhanced Atomic Layer Deposition (PEALD) variando los agentes oxidantes, utilizando vapor de agua, O₃, así como plasmas remoto y directo de agua y O₂. En dependencia de la oxidación utilizada, se tienen distintos defectos en el material, los cuales modifican la función de trabajo, band gap, así como las posiciones de la banda de conducción y valencia respecto al nivel de Fermi. Los defectos se deben principalmente a la reactividad de los agentes oxidantes, siendo esta mayor en el uso del PEALD respecto al ALD. Utilizando la técnica de XPS fue posible determinar estos parámetros a través del estudio de los electrones de alta energía cinética para el caso del máximo de la banda de valencia, los de baja energía cinética para la determinación de la función de trabajo y los electrones dispersados inelásticamente en la región de emisión del O1s para el band gap. Así mismo, se determinó que el estado de oxidación Sn⁴⁺ se encuentra presente en las películas delgadas obtenidas por todos los métodos de oxidación utilizados, identificándose a través del perfil del espectro de banda de valencia. A partir de esta información es posible identificar en dependencia de la estructura de la celda solar que se desee fabricar, el método adecuado para el depósito del SnO₂.

EXTRACCIÓN DE SÍLICE Y CELULOSA COMO APROVECHAMIENTO INTEGRAL DE LA CASCARILLA DE ARROZ

Maria C. Ramírez a,*, Karol M. Vargas a, Alis Pataquiva-Mateus a.

^a Semillero de Nanobioingeniería, Departamento de Ingeniería, Universidad Jorge Tadeo Lozano, Colombia. *Autor de correspondencia: mariac.ramirezh@utadeo.edu.co

Palabras Claves: Subproducto agroindustrial; sílice; celulosa; biopolímero; valor agregado.

Actualmente, la cascarilla de arroz es considerada un subproducto agroindustrial generado en la industria arrocera, cuya disposición final es la principal problemática ambiental debido a su incineración o bajo aprovechamiento que se da en la industria. El propósito de la investigación es realizar el aprovechamiento integral de la cascarilla de arroz mediante la extracción de sílice y celulosa. La materia prima fue lavada y molida, con el fin de obtener mayor área superficial durante las extracciones propuestas. La sílice se extrajo mediante un proceso de precipitación con la formación de silicato de sodio como mediador de la reacción para la formación de gel de sílice en un periodo de 48 horas donde se evidenciaron partículas esféricas con tamaño promedio de 112 nm. Posteriormente, la celulosa se obtuvo a partir de la extracción hidrolítica de etanol – agua (1:1) v/v y un proceso de blanqueamiento, logrando el aislamiento de microfibras de celulosa al someterse en el proceso de hidrólisis. Así mismo, se realizó la caracterización lignocelulósica de la cascarilla de arroz, obteniendo porcentajes de extractos libres, holocelulosa, lignina, alfa celulosa y gamma celulosa de 1,18% y 45,14%, 27.81 %, 12.2 % y 15.06 %, respectivamente. Las partículas se caracterizaron mediante SEM/EDS y FTIR indicando la morfología y presencia de enlaces Si-O-Si, C-O-C y O-H como principales enlaces dentro de la estructura de estas. Por último, las partículas se usaron como recubrimiento de un biopolímero de almidón de arroz presentando características hidrófilas debido a su ángulo de contacto inferior a 90 ° y catalogado como V-1 mediante la prueba de retardante de llama, obteniéndose un material que presenta autoextinguibilidad en presencia del fuego.



CARACTERIZACIÓN DE NUEVOS NANOMATERIALES HÍBRIDOS CON LAS TÉCNICAS SEM – EDS, XPS Y TGA PARA APLICACIONES EN PROCESOS DE RECOBRO MEJORADO

María C. Ruiz* a, Arnold Romero a, Henderson I. Quintero b, Eduardo Manrique b.

a Grupo de Investigación en Química Estructural, Universidad Industrial de Santander, Colombia ^b Grupo de Recobro Mejorado, Instituto Colombiano del Petróleo, Colombia * Autor de correspondencia: macaruiz@uis.edu.co

Palabras Claves: Nanohíbridos; nanopartículas de sílice; microscopía de barrido electrónica; espectroscopia fotoelectrónica de rayos X; análisis termogravimétrico.

En la última década la investigación en nanotecnología ha venido en aumento en la industria petrolera, especialmente en la mejora de procesos de recobro mejorado como la inyección de polímeros. Esto se debe a las propiedades únicas que ofrece la inclusión de nanopartículas al sistema polimérico como la resistencia a la degradación térmica. Sin embargo, es un área aún muy poco explorada, y los resultados se basan principalmente en el efecto en las propiedades reológicas de nanomateriales.

En este trabajo, se presenta una caracterización más detallada que evidencie la formación de un enlace covalente entre nanopartículas de SiO₂ y HPAM (Poliacrilamida Parcialmente Hidrolizada). Las técnicas utilizadas para caracterizar nuevos nanomateriales híbridos fueron la Microscopía de Barrido Electrónica (SEM – EDS), Espectroscopia Fotoelectrónica de Rayos X (XPS) y Análisis Termogravimétrico (TGA).

Los resultados obtenidos con estas técnicas fueron comparados con los precursores de la síntesis, lo que evidencia el cambio morfológico, estructural y de propiedades del nuevo nanomaterial con respecto al polímero sintético. El análisis elemental realizado por EDS comprueban la presencia de C, N, O y Si en la estructura del nuevo nanomaterial basado en nanopartículas de sílice.

Los espectros de alta resolución obtenidos por la técnica XPS evidencian los grupos funcionales correspondientes al enlace covalente entre el polímero y la nanopartícula, lo que le proporciona una mayor resistencia térmica al nanomaterial respecto al polímero convencional. Esta resistencia térmica se determina con TGA, en el cual se somete el precursor polimérico y el nuevo nanohíbrido a una rampa de temperatura de 10°C/min, los cuales presentaron una ventaja competitiva respecto al polímero comercial en todo el rango de evaluación. Los resultados obtenidos en la caracterización de los nuevos nanomateriales generan grandes expectativas en la aplicación de nanomateriales híbridos en procesos de recobro mejorado y permiten identificar rasgos característicos para síntesis futuras de nuevos nanomateriales híbridos.

PRODUCCIÓN Y CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL Y MAGNÉTICA DE NANOCRISTALES DE ÓXIDO DE COBRE CON GRAN CONTENIDO DE FE

Juan D. Arias a, Hernán D. Colorado a, German A. Pérez a, Marisela Benitez a,*.

^a Grupo de Metalurgia Física y Teoría de Transiciones de Fase, Departamento de Física, Universidad del Valle, Colombia * Autor de correspondencia: marisela.benitez@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Oxido de cobre; nanoparticulas; efecto Mössbauer; ciclo de histéresis.

En este trabajo se estudió la influencia de cantidades mayores de hierro en las propiedades estructurales y magnéticas de las nanopartículas de óxido de cobre, los cuales fueron producidos por el método de co-precipitación. Las muestras estudiadas fueron las del sistema ()O, con x = 0.20, 0.25, y 0.30. Las concentraciones del agente de precipitación eran 7 y 8 molar, y con la temperatura de calcinación variable. Desde el refinamiento de Rietveld de los patrones de difracción de rayos X, se encontró que todas las muestras presentaban sólo la estructura monoclínica CuO con un grupo espacial C2/c. Además, se encontró que el tamaño medio de cristalito varía entre 39 y 59 nm, y que la sustitución de Cu por átomos de Fe se produce a lo largo del parámetro a. La espectrometría de Mössbauer (MS) se utilizó para estudiar el comportamiento de los átomos de Fe dentro de la red de CuO. Por mediciones de SEM se detectó que las partículas están presentes como aglomeraciones. Un trabajo anterior informó que para la muestra con x = 0.15, preparada por co-precipitación [1], que las partículas obtenidas son de tamaño nanométrico. La curva ZFC, obtenido por VSM, mostró un pico a 97K, que también fue detectado para una muestra con x = 0.15, que corresponde a una transición de vidrio de espín reentrante.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN ÓPTICA Y ELÉCTRICA DE ZNS Y ZNS DOPADO CON COBRE

Miguel Camargo a,*, Fredy Mesa b, Alis Pataquiva-Mateus a.

^a Semillero en Nanobioingeniería, Departamento de Ingeniería, Universidad Jorge Tadeo Lozano ^b Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas, Universidad del Rosario * Autor de correspondencia: miguel.camargog@utadeo.edu.co

Palabras Claves: Nanopartículas, fotoluminiscencia, resistividad, capacitancia.

El trabajo estudia las propiedades eléctricas y ópticas de nanopartículas de sulfuro de zinc (ZnS) puro y dopado con cobre con una concentración de 2%. La síntesis se realizó mediante el método simple de precipitación química a partir de acetato de zinc y sulfuro de sodio en condiciones de temperatura ambiente y agitación constante. Mediante caracterización por espectrofotometría UV-vis, se encontró una banda máxima de absorción en 319 nm para el ZnS puro, en tanto el ZnS dopado presenta un desplazamiento hacia el rojo teniendo una banda de absorción en 333 nm. Lo cual se verifica en el microscopio de fluorescencia donde se observó como el ZnS puro presenta luminiscencia azul y verde al ser excitado con un láser de luz ultravioleta. Bajo las mismas condiciones, las muestras dopadas, presentan una luminiscencia más intensa verde y rojo, debido a que los iones metálicos crean centros de luminiscencia ópticamente activos, generado a su vez nuevos niveles de energía. El microscopio electrónico de barrido (SEM) reveló que las partículas se encuentran en bloques irregulares presentando algunas aglomeraciones. Por el método FTIR y difracción de rayos X (XRD) se determinaron los grupos funcionales y la estructura cristalina, respectivamente; encontrando en espectrometría infrarroja que dos picos de vibración Zn-S en 1017 y 639cm⁻¹ para el compuesto puro, se dividen al dopar en 1116cm⁻¹, 1117cm⁻¹ y 615cm⁻¹, 666cm⁻¹ respectivamente, evidenciando que átomos de Cu se sustituyeron en la estructura de ZnS. La resistividad presenta el mismo comportamiento en las dos muestras al ser medido en un rango de 20-1x10⁶Hz de frecuencia, pero es mayor en la muestra dopada obteniendo un máximo valor a 20 Hz de frecuencia de 3100ohm, alcanzando un 12% de diferencia respecto a la muestra sin dopar, esto influye en que la capacitancia en el mismo rango sea menor para el compuesto dopado teniendo un punto máximo de 3,4µF a los 20Hz indicando como las propiedades eléctricas se ven afectadas por el dopaje con Cu. Por lo anterior, se concluye que la influencia del dopaje con cobre en las partículas de ZnS mejora propiedades como fotoluminiscencia y resistividad eléctrica

PROPIEDADES ELECTROQUÍMICAS Y FOTOFÍSICAS DE UNA NUEVA METALOREJILLA SUPRAMOLECULAR DE ZINC [2X2]

Miguel A. Rosero Mafla a, Jorge I. Castro Castro a, Cesar A. Mujica-Martínez b, Manuel N. Chaur Valencia a.*. ^a Síntesis y Mecanismos de Reacción en Ouímica Orgánica – SIMEROO, Departamento de Ouímica, Universidad del Valle, Colombia b Grupo de Investigación en Fisicoquímica Básica y Aplicada – GIFBA, Departamento de Química, Universidad de Nariño, Colombia * Autor de correspondencia: <u>manuel.chaur@correounivalle.edu.co</u>

Palabras Claves: Química supramolecular; metalorejilla de zinc [2x2]; propiedades foto-físicas; propiedades electroquímicas; propiedades dependientes del pH.

En el presente trabajo se describe la síntesis y la caracterización estructural de una nueva metalorejilla supramolecular de zinc [2x2], así como la evaluación de sus propiedades foto-físicas y electroquímicas. La síntesis de la metalorejilla de zinc [2x2] se realizó mediante una reacción de complejación de un ligante de tipo bis(hidrazona) con iones metálicos de zinc. El ligante fue obtenido mediante dos etapas de síntesis que involucran una sustitución nucleofílica aromática seguida de una condensación. En este trabajo se presentan resultados de las propiedades electroquímicas de la metalorejilla de zinc y su ligante mediante voltametría cíclica en donde se observa que los picos de reducción de la metalorejilla de zinc están desplazados respecto al ligante indicando un efecto del metal. Adicionalmente, los resultados de las propiedades foto-físicas de la metalorejilla de zinc obtenidos a partir de espectroscopía UV-Vis y de emisión, indican que dichas propiedades presentan una dependencia del pH debido a los diferentes estados de protonación del compuesto. Los resultados indican que la metalorejilla de zinc [2x2] obtenida tiene aplicación en dispositivos opto-electrónicos.



SÍNTESIS, PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y ÓPTICAS DE NANOPARTÍCULAS DE ZNO DOPADAS CON MGO

Mónica Andrea Vargas a,b*, Jesús E. Diosa b, Edgar E. Mosquera b, Jorge E. Rodríguez a. ^a Transiciones de Fase en sistemas no metálicos, Universidad del Valle, Colombia ^b Ciencia y tecnología de materiales cerámicos CYTEMAC, Universidad del Cauca, Colombia * Autor de correspondencia: vargas.monica@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Síntesis; Pechini; óxido de zinc; óxido de magnesio.

El óxido de zinc (ZnO) es un semiconductor, que en años recientes ha generado un gran interés debido a sus propiedades físicas, en el desarrollo de componentes para aplicaciones optoelectrónicas. Sus propiedades ópticas han sido ampliamente estudiadas, llegando a ser considerado en la actualidad un material optoelectrónico con cualidades muy prometedoras para utilizarse en numerosas aplicaciones tecnológicas como sensores de gas en forma de películas delgadas, lásers ultravioleta y visible, y celdas solares.

En este trabajo, se sintetizaron nanopartículas de óxido de zinc (ZnO NPs) y ZnO dopadas con MgO en diferentes concentraciones (0.01, 0.02, 0.04, y 0.06) de manera controlada y reproducible, empleando el método de Precursor Polimérico (Pechini). Para determinar las características fisicoquímicas y estructurales de las nanopartículas sintetizadas se utilizó espectroscopia IR con transformada de Fourier (FTIR), espectroscopia Raman, difracción de rayos X (DRX), espectroscopia UV-Vis y microscopía electrónica de transmisión (TEM). Los resultados de la caracterización indicaron que las partículas obtenidas tenían un tamaño de nanómetros (<100 nm) con morfología esférica. El intervalo de banda de ZnO y ZnO/MgO es 3,3 eV y 3, 8 eV respectivamente, lo que indica que las propiedades ópticas de estas nanopartículas se ven afectadas por la concentración del dopante.

DISEÑO Y FABRICACIÓN DE NANOESTRUCTURAS DE ALÚMINA Y SU EVALUACIÓN COMO NANOCONTENEDOR HIDROFÓBICO INTELIGENTE

Ana M. Nieto a,*, Fabián A. Ríos a.

^a Grupo de Investigación en Corrosión - GIC, Universidad Industrial de Santander, Colombia * Autor de correspondencia: ana2178679@correo.uis.edu.co

Palabras Claves: Nanoestructuras de alúmina; organosilanos; superficie inteligente; nanocontenedor.

Nanoestructuras de alúmina (AAO-NEs) fueron obtenidas por anodizado de aluminio de dos pasos, bajo condiciones de voltaje constante (60 V) durante 3 y 6 horas, en una solución acuosa de ácido oxálico de concentración 0,3 M (H₂C₂O₄). El material sintetizado fue empleado como sustrato para el diseño de un nanocontenedor hidrofóbico inteligente. Las AAO-NEs presentaban morfología con celdas hexagonales y formación de nanotubos, poros de tamaño entre 82 y 112 nm, y espesor de ~70 um. La mezcla de compuestos organosilanos fue usada para crear la superficie inteligente; la presencia de un silano aminado brindaba carácter hidrofílico a los nanoporos, por su parte el silano alifático provocaba que la superficie se tornara hidrofóbica, lo anterior permitió la evaluación del estado de apertura y cierre del sistema bajo condiciones de acidez (pH 5.0) y neutralidad (pH 7.0), respectivamente. La efectividad de la superficie inteligente fue determinada cargando Safranina O como molécula modelo. Posteriormente se estudió su liberación y retención, encontrando que en ambientes ácidos hay liberación espontánea de la carga, mientras que en medio neutro hay retención de gran parte de esta. Se demostró que es posible crear un nanocontenedor hidrofóbico inteligente, sensible al cambio de pH por medio de una superficie mixta que responde a estímulos como la presencia de moléculas anfifilicas. El material sintetizado fue caracterizado con técnicas analíticas como ángulo de contacto, espectroscopia de UV-Vis, FTIR-ATR y SEM.



BIO-COMPOSITOS CONSTITUIDOS DE NANOCELULOSA FIBRILADA Y COPOLÍMEROS EN BASE A HEMA: PREPARACIÓN Y POTENCIAL APLICACIÓN PARA LA SORCIÓN DE AZUL DE METILENO

Estefanía del C. Oyarce a, b, Guadalupe del C. Pizarro b, Diego Oyarzún c, Julio Sánchez a*.

^aDepartamento de Ciencias del Ambiente, Facultad de Química y Biología, Universidad de Santiago. Santiago, Chile.

^b Departamento de Química, Universidad Tecnológica Metropolitana, Santiago, Chile.

^c Center of Applied Nanosciences (CANS), Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Andrés Bello, Santiago, Chile.

* Autor de correspondencia: estefaniaoyarceriveros@gmail.com

Palabras Claves: Nanocelulosa fibrilada; hidrogel; azul de metileno; xerogel.

Los hidrogeles han recibido una gran atención, debido a que estos materiales se pueden modificar químicamente mejorando su estabilidad, propiedades fisicoquímicas y termomecánicas para ser utilizados en el proceso de adsorción de contaminantes en la purificación de efluentes.

En el presente trabajo se sintetizaron, vía polimerización por radical libre, bio-compositos basados en 2-hidroxetilmetacrilato (HEMA) y nanocelulosa fibrilada (NFC), la cual confiere refuerzo mecánico como también compatibilidad con matrices hidrofilicas. La NFC fue obtenida mediante oxidación vía TEMPO de acuerdo a la literatura.

Se utilizó HEMA en combinación con ácido itacónico (AI) y ácido acrílico (AA) en la síntesis junto a diferentes cantidades de NFC para la obtención de materiales capaces de interaccionar con especies catiónicas como el azul de metileno (MB), generando la sorción del colorante.

Los bio-compositos se caracterizaron por técnicas espectroscópicas y termogravimétricas, además, se realizaron estudios de sorción para la eliminación de MB en solución acuosa, en función de variables como pH, concentración MB, cantidad de polímero y efecto de interferentes.

Los resultados muestran una adecuada incorporación de NFC al hidrogel, entregando buenos porcentajes de rendimiento y la caracterización por FTIR muestra señales características de sus componentes. La resistencia térmica es característica de este tipo de hidrogeles. Por otro lado, para la sorción máxima de MB en agua se exhibieron valores altos en comparación con resinas comerciales, en un tiempo de contacto de 24 h. Se comprueba la utilización de estos nuevos materiales bio-nanocompositos, permitiéndonos proyectar la aplicación de estos en la remoción de varios contaminantes catiónicos en solución acuosa.

Agradecimientos: 1. Proyecto Fondecyt Regular (N° 1191336). 2. Programa de Magíster en Química mención Tecnología de los Materiales de la Universidad Tecnológica Metropolitana. 3. Proyecto Interno Universidad Tecnológica Metropolitana (L217-15).

SIMULACIÓN NANOTECNOLÓGICA EN RECUBRIMIENTOS HIDROFÓBICOS UTILIZANDO COMPUESTOS ORDINARIOS PARA LA ENSEÑANZA – APRENDIZAJE DE LA QUÍMICA EN LA FORMACIÓN PROFESIONAL INTEGRAL DEL SENA

Freddy Goyeneche a*, Paula A. Contreras b, Ángel J. González b.

^a Grupo de Investigación CNCA, Servicio Nacional de Aprendizaje SENA, Colombia ^b Semillero de Investigación SIPA, Institución Educativa Distrital María Cano, Colombia * Autor de correspondencia: fgoyenechel@misena.edu.co

Palabras Claves: Sustancia; simulación; nanotecnología; impermeabilizantes.

Ante los avances de la ciencia química, el siglo XXI ha sido marcado por los adelantos de la nanotecnología, está es considerada como un campo amplio y heterogéneo de la tecnología, donde se plantean, caracterizan, producen y aplican estructuras, componentes y sistemas conservando un control del tamaño y la forma de sus elementos constituyentes. Es así, que se emprendió una experiencia realizada con aprendices del Sena Centro Nacional Colombo Alemán CNCA Regional Atlántico, coordinada y asesorada por un instructor asignado a las instituciones educativas públicas del distrito de Barranquilla, donde se hace uso de sustancias impermeabilizantes hidrófobas, las cuales son compuestos químicos que tienen como objetivo repeler el agua impidiendo su paso o absorción, son muy utilizados en el revestimiento de piezas u objetos que deben ser mantenidos secos, además funcionan eliminando o reduciendo la porosidad del material evitando filtraciones y aislando la humedad del medio, donde estos pueden ser de origen natural o sintético, orgánico e inorgánico.

Se desarrollaron sustancias químicas planteando fórmulas caseras para ser tecnificadas en el laboratorio con el fin de simular nanotecnología para recubrimientos hidrofóbicos por medio de compuestos ordinarios que sirvan de impermeabilizantes en telas, plástico, vidrio, cartón y madera. La experiencia se realiza desde un trabajo técnico-pedagógico, con miras a despertar en los jóvenes el espíritu crítico y científico para la resolución de problemas reales en su sociedad, utilizando productos naturales, donde se destaca el aceite de ricino y dentro de los sintéticos el petróleo. Cabe insistir que en estas instituciones públicas se carece de algunos equipos de laboratorio especializado para ejecutar experiencias de muy alta calidad, algunas de estas con excelentes infraestructuras, pero con poca inversión tecnológica que permitan proyectar la experimentación desde las ciencias químicas basadas en la nanotecnología.



ESTUDIO DEL FENÓMENO DE CONMUTACIÓN RESISTIVA EN DISPOSITIVOS TIPO CAPACITOR BASADOS EN ÓXIDOS MULTIFUNCIONALES

Santiago Ceballos a*, Lorena Marín a, b, María Elena Gómez a, b, Alexander Cardona c, Juan Gabriel Ramírez c.

a Grupo de Películas Delgadas, Departamento de Física, Universidad del Valle, Colombia.

b Centro de Excelencia en Nuevos Materiales — CENM, Universidad del Valle

c Laboratorio de Nanomagnetismo, Departamento de Física, Universidad de los Andes

* Autor de correspondencia: ceballos@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Conmutación resistiva; ; ; Ag; resistance switching; memoria resistiva; películas delgadas

La conmutación resistiva, referida en inglés como resistive switching (RS), es un fenómeno físico presente en materiales dieléctricos, en estado sólido y en configuración tipo capacitor metal-aislantemetal (MIM, siglas en ingles), los cuales pueden presentar cambios reversibles de estados resistivos metaestables cuando son sometidos a campos eléctricos (o voltajes) externos. Estados resistivos específicos, conocidos como estados de baja (LRS, siglas en ingles) y alta resistencia (HRS, siglas en inglés), logran ser mantenidos por el dieléctrico en ausencia de tensiones eléctricas, lo que permiten ser empleados en dispositivos de lectura, escritura, transferencia y almacenamiento de información no volátiles. En el presente trabajo nosotros estudiamos la variabilidad de los estados LRS y HRS en un dispositivos verticales de óxidos multifuncionales de en forma de películas delgadas depositados sobre sustratos de LSAT usando la técnica de sputtering en función del electrodo superior de y. Se realizaron pruebas de caracterización estructurales, además de curvas corriente vs voltaje (I-V) y su proceso de electroformación, curvas de resistencia vs tiempo (RS), tiempo de retención y capacitancia vs voltaje donde se logró observar la estabilidad del efecto de conmutación resistiva y la asimetría del efecto en función del electrodo superior; siendo más estable y simétrico en las muestras de electrodo superior pero con menor diferencia entre estados respecto a la muestra con el electrodo superior de el cual presentó asimetría en su comportamiento de conmutación resistiva. Por tanto, se demuestra para este tipo de dispositivos, que el es mejor candidato como electrodo dada su estabilidad frente a la variabilidad de los estados HRS y LRS lo cual es de gran relevancia para la implementación de esta tecnología.

EFECTO DE LA APLICACIÓN DE ULTRASONIDO EN LA SÍNTESIS DE ESTRUCTURAS TRIDIMENSIONALES DE ÓXIDO DE GRAFENO MEDIANTE EL MÉTODO DE AUTOENSAMBLAJE IN-SITU

Sergio A. Lesmes a*, Oscar J. Castro a, Rafael Cabanzo a, Enrique Mejía a.

^a Laboratorio de Espectroscopía Atómica y Molecular (LEAM), Universidad Industrial de Santander, Colombia. * Autor de correspondencia: sergio.lesmes@hotmail.com

Palabras Claves: Óxido de Grafeno; espuma de grafeno; reducción química; hidrogel de grafeno.

El óxido de grafeno se caracteriza por la presencia de variedad de grupos oxigenados en su superficie y elevada área superficial, que lo hacen atractivo para aplicaciones en adsorción de diferentes contaminantes, sin embargo, recientemente las estructuras tridimensionales de óxido de grafeno (3DGO) han atraído un gran interés debido a que potencia las propiedades de adsorción del óxido de grafeno, permite su recuperación en medios acuosos, una morfología variada y propiedades mecánicas que amplía las aplicaciones potenciales del óxido de grafeno. En este trabajo se presenta el estudio del efecto de la aplicación de ultrasonido en la formación y características fisicoquímicas de las 3DGO, obtenidos mediante el método de auto ensamblado in situ de óxido de grafeno, por reducción química usando ácido ascórbico. Las 3DGO obtenidos se caracterizaron por medio de espectroscopia de Infrarrojo, espectroscopía UV-Vis, Difracción de Rayos X, espectroscopia Raman, Microscopia Electrónica de Barrido (SEM) y análisis textural por adsorción - desorción de Nitrógeno. El efecto de la aplicación de tiempos cortos de ultrasonido permitió la cohesión y formación de las 3DGO. Una vez confirmada la presencia de óxido de grafeno se evidencia que las 3DGO obtenidas exhiben una estructura uniforme con microporos y mesoporos, con agregados no rígidos. Finalmente, se realizaron experimentos de adsorción de colorantes dispersos en agua que permitieron confirmar la mejora en la adsorción de las 3DGO.



PREPARACIÓN Y ESTABILIDAD DEL NANOREFRIGERANTE A BASE DE NANOPARTÍCULAS DE ALOFÁN SINTÉTICO Y PROPILENGLICOL

Jorge E. Silva-Yumi ^{a*}, Telmo Moreno ^b, Edwin Cayambe ^b, Aidé Castañeda ^b, Gabriela Chango ^b.

^a Facultad de Ciencias, Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, Ecuador

^b Facultad de Mecánica, Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, Ecuador

* Autor de correspondencia: jorge.silvay@espoch.edu.ec

Palabras Claves: Alofán; nanofluido; nanorefrigerante; propilenglicol; sodio dodecil sulfatotado.

El uso eficiente de energía es una prioridad en los actuales momentos, los nanorefrigereantes constituyen una alternativa para el aprovechamiento óptimo de energía ya que mejoran las propiedades de transferencia de calor de los refrigerantes tradicionales. El óxido de silicio y el de aluminio son nanopartículas utilizadas para elaborar nanorefrigerantes, en esta investigación se plantea que las nanopartículas de alofán, un aluminosilicato constituido por silicio y aluminio podrían mejorar las propiedades de transferencia de calor del propilenglicol. En una primera etapa esta investigación se enfoca en la obtención del nanorefrigerante a base de propilenglicol y alofán para posteriormente evaluar sus propiedades térmicas en un chiller. Las nanopartículas de alofán se obtuvieron por el método de coprecipitación a partir de nitrato de aluminio y silicato de sodio, la caracterización se realizó por microscopía electrónica de barrido, espectroscopía de energía dispersiva de rayos X y espectroscopía infrarroja. Pare elaborar el nanorefrigerante se evaluaron concentraciones de 0.2 y 0.5% en masa de nanopartículas y 15% y 21% en volumen de propilenglicol. Para la estabilidad se evaluó la variación del pH desde 4.0 hasta 9.0 y el uso de sodio docecil sulfato (SDS) en concentraciones de 0.2, 0.4 y 0.6% en peso para el 0.2% de nanopartículas y 0.5, 1.0 y 1.5% en peso para el 0.5% de nanopartículas, el seguimiento de la estabilidad del nanorefrigerante se realizó por espectroscopía UV-visible. La caracterización corroboró que las nanopartículas corresponden a alofán, las microscopías muestran agregación de las nanopartículas y el predominio de silicio sobre aluminio en la composición. La utilización de SDS permitió obtener una mayor estabilidad del nanorefrigerante, 24 horas, en las muestras con 0.5% en masa de nanopartículas, 0.5, 1.0 y 1.5% en peso de SDS y 21% en volumen de propilenglicol en comparación con las muestras con 0.2% en masa de nanopartículas, 0.2, 0.4 y 0.6% en peso de SDS y 15 y 21% en volumen de propilenglicol en las cuales se observa sedimentación antes de las 10 horas. La variación del pH no permitió mejorar la estabilidad ya que las nanopartículas tienden a agregarse y sedimentar antes de los 20 minutos.

ESTUDIO TERMOELÉCTRICO SOBRE LA APLICACIÓN DE UNA MEMBRANA POLIMÉRICA DE CONDUCCIÓN PROTÓNICA COMPUESTA POR PVOH + H₃PO₄ EN UNA CELDA COMBUSTIBLE FUNCIONANDO HASTA LOS 50°C

E. Gutiérrez a, V. H. Zapata a*.

a Grupo de Óxidos Avanzados, Universidad Nacional de Colombia campus Medellín, Colombia

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

Palabras Claves: Celdas de combustible; polialcohol de vinilo (PVOH), ácido fosfórico (H₂PO₄), conductividad protónica.

Resultados en calorimetría diferencial de barrido (DSC) en diferentes muestras de polialcohol de vinilo (PVOH) y ácido fosfórico (H,PO₄), en relación molar OH/P: 0.20, 0.33 y 0.40, presentan corrimiento de las temperaturas de transición vítrea Tg, y temperatura de reblandamiento (ó fusión) Tm, hacia valores bajos a partir de los valores iniciales del polímero (75°C y 210°C respectivamente), indicando el efecto de la adición del ácido sobre el PVOH. Resultados mediante el uso de la técnica de espectroscopia de impedancia compleja (IS) muestran valores altos en la conductancia (10⁻²–10⁻³ S) para la muestra OH/P: 0.33 con barridos de temperatura entre 25°C y 140°C mostrando una gran coordinación de los iones H+ en la membrana de intercambio protónico usada en la celda y presentando energías de activación del orden de 0.4 eV. Los barridos con frecuencia muestran comportamientos dinámicos del ion H⁺ en la interface electródica y el bulto de la membrana entre los 42 Hz y 5 MHz permitiendo el ajuste y análisis de datos a dos circuitos R-CPE. La potencia generada en la celda construida con esta membrana alcanza un valor aproximado de 2500 µW/cm² (27 °C) mediante flujos de H, y O, de 0.2 L/min, con medidas realizadas entre los 25°C y los 60°C donde la membrana de PVOH+H₂PO₄ presenta una mayor potencia en la celda a temperaturas mayores a 35°C comparada con la usada de NAFION®. La potencia registrada por la celda de NAFION® a 50°C fue de 0,168 μW mientras que la registrada por la celda de PVOH+H₃PO₄ a igual temperatura fue de 49 μW; es decir, los valores de voltaje y corriente generada por la celda con dicha membrana se mantienen con el aumento de la temperatura mucho mejor que el NAFION® mostrando una mayor eficiencia en altas temperaturas.



EVALUACIÓN DE LA OBTENCIÓN DE UNA SOLUCIÓN COLOIDAL DE NANOPARTÍCULAS HIERRO ZERO VALENTE USANDO EXTRACTOS VEGETALES PARA REMEDIACIÓN DE AGUAS RESIDUALES DE PROCESOS INDUSTRIALES

William R. Pineda a*, Jennifer L. Márquez a.

^a Centro de Gestión Industrial, Servicio Nacional de Aprendizaje SENA, Regional Distrito Capital Bogotá, Colombia.

* Autor de correspondencia: wrpineda@misena.edu.co

Palabras Claves: Nanopartículas; agua residual; metales pesados; síntesis verde

El agua es usada como recurso hídrico por las industrias, producto de ello se generan aguas residuales industriales (ARI) vertidas a fuentes superficiales y alcantarillados, la presente investigación realizá la síntesis de nanopartículas de Hierro Zero Valentes (NHZV) para la remediación de metales pesados en ARI. Se diseñó un análisis de experimentos tipo factorial (Experimentos=2K+r). La síntesis utilizó un extracto etanólico concentrado de hoja de aguacate "Persea americana Mill", FeCl₃ con concentraciones (0,1-1) mM, velocidad de agitación 450 rpm, pH (9- 10), y tiempo de reacción de 30 minutos, el producto final se almacenó a 4°C. Los análisis realizados fueron: espectrofotometría UV-VIS con un pico de absorción en un rango de longitud de onda de 360-370 nm; ancho total a media altura FWHM (del inglés Full Width at Half Maximum), caracterización de NHZV por microscopía de fuerza atómica (AFM) en modo de no contacto (NCRL), como resultados rango de dispersión de tamaño de partícula estimado entre (120-280) nm. La adsorción de Mercurio, Arsénico y Cromo por las NHZV actualmente está en estudio por colorimetría y absorción atómica.

ESTUDIO DEL EFECTO DEL SI EN EL SISTEMA FE, SN

Yovany Hernández a*, Carlos A. Palchucan a, Ligia E. Zamora a, German Pérez a.

Departamento de Física, Universidad del Valle, Meléndez, A.A 25360, Cali, Colombia.

* Autor de correspondencia: yovany.hernandez@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Imanes permanentes; espectrometría; magnetismo; materiales magnéticos.

En este trabajo se presentan los resultados del análisis estructural y propiedades magnéticas en el sistema Fe₃Sn cuando el Sn es sustituido por Si. El Fe₃Sn se conoce por ser un material potencial para obtener un imán permanente libre de tierras raras. Las muestras de $Fe_3Sn_{Lx}Si_x$ con x = 0.00, 0.05, 0.10 y 0.20 se prepararon por medio de reacción de estado sólido. Las técnicas experimentales utilizadas para la caracterización fueron magnetización de muestras vibrante (VSM), difracción de rayos-X (DRX), espectrometría Mössbauer (EM), microscopia electrónica de barrido (SEM) y análisis de termogravimetría magnética (TGM). El análisis de VSM mostró que todas las muestras son magnéticamente blandas, y los valores más altos para la magnetización de saturación fue Ms =133 Am^2 / kg , el campo coercitivo Hc = 5,19 mT y la constante de anisotropía $k_1 = 1.48 \text{ MJ} / m^3$ para la muestra x = 0.00. Los patrones de rayos-X de las muestras se ajustaron con las fases hexagonales: Fe₃Sn, FeSn (Fe rodeado por diferentes entornos de Sn), Fe_{1,84}Sn_{0,16} y la fase cúbica del Sí. De los resultados obtenidos se puede concluir que el Si queda segregado en la muestra y no se introduce en la matriz de Fe₃Sn. Usando el programa Mosfit los espectros Mössbauer fueron ajustados con 4 sextetes, asociados a las fases Fe₃Sn y FeSn (Fe rodeado por diferentes entornos de Sn), estos resultados demuestran que al aumentar la concentración del Si se estabiliza la fase Fe, Sn. La microscopia electrónica de barrido mostró una morfología no homogénea y que el tamaño de grano promedio de cada muestra crece conforme aumenta el dopaje de Sn; siendo esta del orden de las micras. Del análisis termogravimétrico se evidenció que las muestras tienen dos transiciones magnéticas asociadas a las faces Fe₃Sn y Fe_{1.84}Sn_{0.16}, resultado que coincide con los ajustes hecho en los espectros Mössbauer.



SÍNTESIS HIDROTÉRMICA DE NANOESTRUCTURAS DE CARBONO FLUORESCENTES (NC) A PARTIR DE AVENA EN HOJUELAS

Mayra A. Parada López ^a, Silvia J. Leal Sotelo ^a, Yuly A. Prada ^a, Rafael Cabanzo Hernández ^{a*}.

^a Laboratorio de Espectroscopia Atómica y Molecular (LEAM), Centro de Materiales y Nanociencias (CNM). Parque

Tecnológico Guatiguará. Universidad Industrial de Santander, Colombia.

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

Palabras Claves: Síntesis hidrotérmica; nanoestructuras de carbono (NC); avena; sólidos fluorescentes.

La síntesis de nanoestructuras de carbono con propiedades fluorescentes se ha convertido en un campo de investigación novedoso con múltiples aplicaciones como marcadores en bioimágenes y biosensores ópticos. En ese sentido, la implementación de nuevos métodos de síntesis eficientes, versátiles y no contaminantes como la síntesis hidrotérmica asistida por microondas ocupa gran interés ya que las NC pueden ser obtenidas a partir de fuentes de carbono naturales como la avena. Bajo estas consideraciones, se realizó la síntesis a partir de una dispersión de avena en hojuelas (50 g/L) previamente triturada. La síntesis hidrotérmica se llevó acabo a dos temperaturas diferentes (180°C y 200°C) con tiempos de reacción de 30 y 90 minutos. En el medio de síntesis fue empleado el ([3-(2-Aminoetil) aminopropil]-trimetoxisilano) en una relación molar de 1:7 (polímero/avena) como agente polimérico estabilizante. Las nanoestructuras fueron caracterizadas empleando Espectroscopía de Fluorescencia en régimen estacionario, Dispersión de la Luz en Modo Dinámico (DLS), UV Vis y Espectroscopía Infrarroja (FTIR-ATR). Los resultados mostraron que las NC obtenidas a 200°C y 90 minutos de reacción exhibieron mayor intensidad en un rango de emisión de 400-430 nm. Adicionalmente, la fluorescencia observada en las NC con agente polimérico fue significativamente más intensa comparada con la fluorescencia exhibida por las NC libres de polímero con un rendimiento cuántico de 1.5 veces mayor.

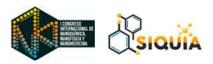
BIOSYNTHESIS OF SILVER NANOPARTICLES FROM ARCTIUM LAPPA AND ITS ANTIFUNGAL ACTIVITY AGAINST PHYTOPHTHORA INFESTANS AND ALTERNARIA

Vanessa Restrepo a*, Juan C Zambrano a, Carlos A Rosero a.

^a Servicio Nacional de Aprendizaje-SENA, Regional Nariño – Tecnoacademia. Colombia. * Corresponding author: vanechemistry@gmail.com

Keywords: Green synthesis; silver nanoparticles; *Arctium lappa*; antifungal activity.

It was possible to synthesize silver nanoparticles (AgNPs) using Arctium lappa extract as reducing agent and stabilizer. The AgNPs were characterized by UV-vis spectrophotometry with a maximum wavelength of 422 nm. Through atomic force microscopy (AFM) and scanning electron microscope (SEM) the spherical morphology of nanoparticles was determined with an average size of 40 nm. The AgNPs demonstrated antifungal activity, were able to inhibit the growth of *Phytophthora infestans* and Alternaria with a diameter of inhibition of 34 and 22 mm, respectively, for a concentration of 0.1 mg/mL of silver nanoparticles. The biosynthesized AgNPs could be used as a control in the agricultural sector affected by these fungi.



ENCAPSULAMIENTO DE CURCUMINA EN NANOFIBRAS DE PVAL-OH, MEDIANTE LA TÉCNICA DE ELECTROSPINING

María C. Páez a*, Leonardo Padilla Sanabria b, José H. Castillo a, Luis R. Vargas a,b. a Grupo de Física de Materiales Inorgánicos y Orgánicos, Universidad del Quindío, Colombia ^b GYMOL Grupo de Inmunología Molecular, Universidad del Quindío, Colombia *Autor de correspondencia: mcpaezp@uqvirtual.edu.co

Palabras Claves: Nanotecnología; nanofibras; aceites esenciales; antimicrobianos; encapsulamiento.

Actualmente al hacer referencia a la medicina tradicional, se incluyen fármacos a base de hierbas, extractos e infusiones y diversos materiales vegetales. La Curcumina ha demostrado tener propiedades terapéuticas, no tóxicas, con funciones antimicrobianas, que constituyen una nueva clase de agentes para el control de enfermedades; el uso de métodos tradicionales para administración de medicamentos, incluidos los métodos orales e invecciones, podrían ser ineficientes debido a que su absorción no se da de manera adecuada. En este trabajo, se presenta la obtención de nanofibras de PVAL-OH, donde se disuelve 1 gramo de polímero en 20 ml de agua milli-Q, para lograr la homogenización de la solución se utilizará un agitador magnético durante 30 minutos manteniendo una temperatura de 100°c, una vez disuelto el polímero, la solución se lleva a temperatura ambiente bajo agitación durante 2 horas adicionales. Del mismo modo se prepara una solución polímero-fármaco, usando Curcumina. La mezcla homogénea se invecta mediante un sistema de aguja, en una recámara cerrada que se mantiene bajo condiciones de equilibrio térmico y mecánico, se aplica una diferencia de potencial de 28 kV entre aguja-colector, una humedad relativa del 30%, velocidad de inyección de 4 µL/h, y un tiempo de crecimiento de 1 hora hasta obtener un parche aproximadamente de 1 mL de espesor. Se evalúa la morfología de las fibras y se caracterizan por microscopia electrónica de barrido (SEM), evidenciando la presencia de defectos en forma de perlas tanto para las fibras con y sin fármaco. Se obtiene distribución de diámetros homogéneos de las fibras, con valores promedio entre 90 y 100 nm. Mediante la técnica de espectroscopia UV-vis, se identifica un pico de absorción la curcuma para una longitud de onda de 310 nm, permitiendo identificar que el fármaco se retiene en las nanofibras poliméricas. Se evalúa la actividad antimicrobiana en S. Aureus y Cándida Albicans, evidenciando actividad farmacológica.

ESTUDIO DE LA ADSORCIÓN DE IONES METÁLICOS DE CROMO Y PLOMO EN SOLUCIÓN ACUOSA MEDIANTE EL USO DE MEMBRA-NAS MODIFICADAS CON NANOPARTÍCULAS

Daniel F. Guevara Bernal a*, Paola A. Castillo Fernández a, Marlon J. Cáceres Ortiz b, Jorge A. Gutiérrez Cifuentes c, Angélica M. Candela Soto a.

^a Grupo de Investigación en Nuevos Materiales y Energías Alternativas GINMEA, Facultad de Química Ambiental, División de Ingenierías y Arquitectura, Universidad Santo Tomás-Bucaramanga, Colombia

^c Facultad de Ciencias de la Salud, Universidad del Quindío, Colombia

* Autor de correspondencia: daniel.guevara@ustabuca.edu.co

Palabras Claves: Metales pesados; membranas poliméricas; nanopartículas de plata; micelas inversas.

Esta investigación tiene como objetivo principal el estudio de la adsorción de los iones metálicos de cromo 56 y plomo 208 en una solución acuosa mediante el uso de membranas poliméricas modificadas con nanopartículas de plata y un transportador, así como la evaluación de su actividad bactericida sobre Escherichia coli 0157:H7, Pseudomonas aeruginosa ATCC 27853 y Staphylococcus aureus resistente a la meticilina (SARM).

La síntesis de las membranas poliméricas se hizo mediante la mezcla de la solución de triacetato de celulosa, 2-nitrofeniloctileter como plastificante, el ácido di-(2etilhexil) fosfórico como agente extractante y con nanopartículas de plata sintetizadas por micelas inversas en diferentes relaciones de Agua/Surfactante (W) de 2, 7 y 12.

La adsorción de metales se llevó a cabo en un equipo rotor con velocidad constante durante 24 horas y posteriormente se realizó la determinación y cuantificación de los metales mediante la técnica de ICP-MS. La caracterización morfológica de las membranas se realizó utilizando la técnica de microscopía electrónica de barrido. Los resultados de extracción utilizando las membranas sintetizadas, muestran que el porcentaje de adsorción para el cromo fue del 99% y 98% para el plomo, sin embargo, la presencia de las nanopartículas de plata en la membrana no significó un aumento en la adsorción de los iones metálicos estudiados. Aunque el uso de las nanopartículas de plata en la membrana tenía como finalidad estudiar su efecto bactericida sobre Escherichia coli 0157:H7 y Pseudomonas aeruginosa ATCC 27853 y SARM, los resultados muestran que la actividad bacteriostática es moderada con una reducción de 2 logaritmos, lo cual significa que existe un efecto inhibitorio intermedio es decir, que su crecimiento disminuye pero no es inhibido completamente frente a Escherichia coli O157:H7 y SARM, de modo que este efecto está asociado a los compuestos activos adicionados a la membrana mas no a las nanopartículas.

^b Grupo de Investigación en Bioquímica y Microbiología GIBIM, Escuela de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Industrial de Santander.



LOCALIZACIÓN ELECTRÓNICA EN SISTEMAS CUASI-UNIDIMEN-SIONALES: UNA APLICACIÓN AL ADN

Luis G. Mesa a, A. C. Garcia-Castro a, Carlos J. Páez a*

a Escuela de Física, Universidad Industrial de Santander, Colombia *Autor de correspondencia: cjpaezg@uis.edu.co

Palabras Claves: ADN; localización electrónica; razón de participación; cuasi-unidimensional

En este trabajo se discute la localización electrónica en sistemas casi-1D: el caso estrictamente 1D de cadenas de polianilinas y el ADN modelado como una doble cadena. En ambos sistemas se estudió la longitud de localización, obtenida usando la aproximación tight-binding, un método heurístico que permite identificar como la función de onda es distribuida sobre el ADN. Utilizamos una cantidad física llamada razón de partición (RP), que indica la fracción de la densidad de carga (probabilidad electrónica) sobre cada uno de los sitios atómicos. El resultado obtenido sugiere un nuevo criterio para analizar la extensión de la función de onda en sistemas mesoscópicos dentro del régimen difusivo de transporte como una información complementaria para la longitud de localización.

LOCALIZACIÓN DE CARGA EN UNA MONOCAMADA DE GRAFENO: EL PAPEL DE LAS VACANCIAS SOBRE LA POLARIZACIÓN DE LA RED

Juan S. Espitia a, A. C. Garcia-Castro a, Carlos J. Páez a*

^a Escuela de Física, Universidad Industrial de Santander, Colombia * Autor de correspondencia: cjpaezg@uis.edu.co

Palabras Claves: Grafeno; localización de carga; razón de participación; subredes

En este trabajo se investigaron los efectos de átomos faltantes (vacancias) sobre la polarización de subredes y las propiedades de localización de carga en una monocapa de grafeno con bordes bien definidos. Se utilizó la aproximación tight-binding, un método heurístico que permite identificar como la función de onda es distribuida en el sobre la monocapa. Asimismo, una cantidad física llamada razón de partición (RP), que indica la fracción de la densidad de carga (probabilidad electrónica) sobre cada uno de los sitios atómicos. Como resultado, se obtuvo un incremento en la deslocalización de la función de onda cuando la distancia de las vacancias a los bordes y las distancias inter-vacancias disminuyen. La activación de un campo magnético introduce una nueva escala de longitud que revela aspectos contraintuitivos de la interacción entre los aspectos puramente geométricos del sistema y la naturaleza subyacente de la escala atómica del grafeno.



FORMULACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE NANOSUSPENSIONES DE RESVERATROL PARA ADMINISTRACIÓN OCULAR EN EL TRA-TAMIENTO DE RETINOPATÍA DIABÉTICA

Pedronel Araque ^{a*}, Natalia Jaramillo ^a, Marta E. Londoño ^b, Sandra M. Naranjo ^a, <u>Sandra A. Torijano ^a</u>

^a Grupo de Investigación e Innovación en Formulaciones Químicas, Universidad EIA, Colombia

^b Grupo de Investigación en Ingeniería Biomédica-GIBEC, Universidad EIA, Colombia

* Autor de correspondencia: pedronel.araque@eia.edu

Palabras Claves: Nanosuspensiones; resveratrol; estabilidad coloidal; potencial zeta; rinopatía diabética.

La retinopatía diabética es una complicación de la diabetes que afecta los ojos. Es causada por el daño a los vasos sanguíneos que van al tejido sensible a la luz que se encuentra en el fondo del ojo (retina). En busca de nuevos tratamientos innovadores para la administración ocular de fármacos, en el presente trabajo se plantea la formulación y caracterización de nanosuspensiones de resveratrol como alternativa al tratamiento de la retinopatía diabética. Las nanosuspensiones de resveratrol fueron estabilizadas utilizando Tween 20, Span 20 y carboximetil celulosa. Las nanosuspensiones fueron caracterizadas respecto al tamaño de partícula por difracción laser, potencial zeta y estabilidad coloidal óptica utilizando Multiscan 20 por un periodo de 24 horas a 37 °C. Las formulaciones fueron estables a una concentración de resveratrol del 0,01%; carboximetilcelulosa al 1%, Tween 20 y Span 20 al 0,008% y 0,002% respectivamente. El HLB del sistema fue igual a 15 para un pH = 7.01. La nanosuspensión se clasificó como un sistema polidisperso con un tamaño promedio de partícula de $140.7 \text{ nm} \pm 2.7 \text{nm}$; con un D10 $\leq 95.2 \text{ nm} \pm 1.1 \text{ nm}$; D50 $\leq 127 \text{ nm} \pm 4 \text{ nm}$ y D90 $\leq 202.9 \text{ nm} \pm 7.8$ nm. Durante las 24 horas de análisis de estabilidad coloidal se evidenció una velocidad de migración -0.133 ± 0.001 mm/hora, un perfil de transmisión constante, y un perfil de retrodispersión con variaciones del 10%, lo que representa una formulación estable a la sedimentación. La estabilización de las nanoparticulas se atribuye no solo al HLB de la mezcla de surfactantes, si no a la estabilización estérica que genera la carboximetil celulosa, dado que la medida de potencial zeta se encuentra entre -0.614 y -3.52 mV. Aunque las regulaciones determinan que las suspensiones oftálmicas deben tener un tamaño de partícula especifico, donde, no más de 20 partículas sean mayores a 25µm, no más de 2 partículas mayores a 50µm y ninguna partícula debe ser mayor a 90µm, es importante evaluar la migración y proliferación de células endoteliales humanas de retina en presencia y luego de su exposición a la nanaosuspensión.

DESARROLLO DE NANO-BIOCONJUGADOS BASADOS EN NANO-PARTÍCULAS DE ORO Y HEBRAS DE ADN PARA AMPLIFICACIÓN DE LA SEÑAL EN BIOSENSADO

Nestor S. Cajigas ^a, Daniel Alzate ^a, Jahir Orozco ^{a*}

^a Max Planck Tandem Gruop in Nanobioengineering, Universidad de Antioquia, Complejo Ruta N, Calle ⁶⁷ # ⁵²-²⁰, Medellín, 050010, Colombia

*Autor de correspondencia: grupotandem.nanobioe@udea.edu.co

Palabras Claves: Nanopartículas; nano-bioconjugados; amplificación, biosensado.

La mayoría de los ensayos clínicos para la detección de biomarcadores asociados a patologías son costosos, tardan mucho tiempo y están limitados por los bajos niveles de concentraciones presentes en muestras biológicas. El desarrollo de nuevas plataformas que permitan la detección de biomarcadores específicos, a bajos niveles de concentración, es altamente necesario. Los nanomateriales han emergido como herramientas prometedoras en el campo de la biomedicina debido a sus propiedades mejoradas con respecto a los materiales a gran escala. Los nanomateriales funcionalizados con biomoléculas dan como resultado nanobioconjugados, con un gran potencial en aplicaciones biomédicas. Este trabajo da cuenta del desarrollo de nanobioconjugados basados en cadenas simples de ADN dispuestas racionalmente sobre la superficie de nanopartículas de oro (NPsO), para la amplificación de señales de eventos de bio-reconocimiento mediante detección electroquímica.

Las NPsO se sintetizaron a partir de un precursor de oro mediante un método de reducción previamente reportado. Los nanobioconjugados se obtuvieron mediante funcionalización de las NPsO con hebras de ADN tioladas. La monocapa de hebras de ADN resultante que recubre las NPsO es mixta; es decir, una hebra de ADN es complementaria al blanco molecular (sonda de señal) y la otra hebra, terminada en biotina o digoxigenina (sonda espaciadora), sirve como punto de anclaje de un complejo reportero basado en enzimas. Se estudió el efecto del pH, la fuerza iónica y la temperatura de hibridación en la estabilidad de los nanobioconjugados. Utilizando nanopartículas magnéticas recubiertas con estreptavidina y decoradas con una sonda específica de captura se establecieron las mejores condiciones experimentales de los ensayos. Se analizaron seis relaciones molares de sonda de señal y sonda espaciadora mediante colorimetría con complejos tanto de estreptavidina-HRP como de digoxigenina-HRP. Cuando los resultados colorimétricos se trasladaron al formato electroquímico, se usaron electrodos de carbón serigrafiados que se decoraron con nanoestructuras jerárquicas de oro para anclar sondas de captura tioladas. Se optimizó la concentración de sal de oro, sonda de captura, agente espaciador y complejo electroactivo de Ru (III) para la transducción de las señales. Las múltiples hebras de señal y espaciadoras que forman parte del nanobioconjugado, son múltiples sitios disponibles para interactuar con el complejo reportero, dando como resultado un aumento dramático de la señal electroquímica. La respuesta del genosensor resultante fue de 10 fM a 10 pM, lo que demostró la gran capacidad de amplificación de la señal de los nanobioconjugados.



CHEMICAL AND MORPHOLOGICAL ANALYSIS OF RGO/ZNO COM-POSITES OBTAINED BY MICROWAVE-ASSISTED HYDROTHERMAL METHOD

Aura S. Merlano a*, Rafael Cabanzo b, Lina M. Hoyos c, Enrique Mejía b, Freddy R. Pérez a, Ángel R. Salazar a Grupo de Óptica y Espectroscopía (GOE), Centro de Ciencia Básica, Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín, Colombia.

^b Laboratorio de Espectroscopía Atómica y Molecular, Escuela de Química, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.

^c Grupo de Biología de Sistemas, Línea de Nanosistemas, Escuela de Ciencias de la Salud, Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín, Colombia.

* Corresponding author: <u>aura.merlano@upb.edu.co</u>

Keywords: Graphene oxide; ZnO; composites; microwave irradiation; hydrothermal method.

A chemical synthesis route for facile, fast and economical production of reduced graphene oxide/zinc oxide composites (rGO/ZnO) via a microwave-assisted hydrothermal method is presented. In this *in-situ* technique, the reduction of graphene oxide (GO) and formation of ZnO structures occur simultaneously resulting in a high synthesis efficiency of rGO/ZnO composites. First, the GO was prepared by the Tour method and then, ZnO structures were anchored on the GO surface by a microwave-assisted hydrothermal method. For a particular concentration (124 mM) of zinc acetate 2-hydrate (Zn(CH₃COO)₂.2H₂O) different microwave irradiation times of the order of seconds were tested in order to select the more adequate time. Furthermore, with the selected irradiation time (40 s), different concentrations (31, 62 and 124 mM) were then considered to evaluate chemical and morphological properties of the obtained composites. For their characterizations SEM, EDS, FTIR, Raman spectroscopy and XRD were employed.

For the different precursor concentrations, SEM micrographs confirmed that, effectively, ZnO structures were anchored on GO sheets. EDS analysis confirmed that the samples contained carbon, zinc, oxygen and potassium. The FTIR spectrum of GO showed the presence of oxygen with intense peaks corresponding to the functional groups O-H, C=O, C=C and C-O. The peak intensities of O-H and epoxy groups were dramatically decreased in the spectra of final composites indicating the reduction of GO. All samples of rGO/ZnO showed an intense peak at about 430 cm⁻¹ corresponding to Zn-O stretching vibration. These results and XRD analysis confirmed that the ZnO structures were successfully deposited on the surface of rGO sheets. Raman spectroscopy allowed, apart from also confirming the formation on the hybrid structure, estimating the amount of defects or disorder in the rGO/ZnO composites. Experimental results confirm that the proposed synthesis route for the fabrication of ZnO/rGO is efficient, environmentally friendly and cost-effective.

DESARROLLO DE NANOPARTÍCULAS DE ÓXIDO DE TITANIO FUN-CIONALIZADAS CON CURCUMINA

Miryam P. Sánchez Castañeda a, Diana Blach a, Cristian C. Villa a*.

^a Programa de Química. Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías. Universidad del Quindío. Cra ¹⁵ Calle ¹² N. Armenia. Quindío. Colombia

* Autor de correspondencia: ccvilla@uniquindio.edu.co

Palabras Claves: Nanopartículas de óxido de titanio; curcumina; sinergia.

Al utilizar la fotosensibilización como tratamiento para controlar la contaminación por microorganismos, idealmente el fotosensibilizador a emplear debe ser seguro para el consumo humano, rentable, bioquímicamente estable y fácil de activar utilizando luz a una longitud de onda específica. Se ha logrado determinar que algunos productos naturales pueden usarse de manera efectiva como fotosensibilizadores en la descontaminación microbiana en productos alimenticios, entre estos productos cabe resaltar la acción de la curcumina, la cual se ha empleado en varios estudios frente a diferentes microorganismos y se ha llegado a la erradicación de la mayoría de estos patógenos microbianos. Por otro lado, algunos estudios han reportado el uso de nanopartículas de óxido metálico como el óxido de titanio y el óxido de zinc las cuales se utilizan como catalizadores para generar de superóxido o hidroxilo para la erradicación de los microorganismos y a su vez la oxidación de compuestos orgánicos. En este trabajo se realizó la síntesis de un sistema conjugado de nanopartículas de TiO₂ y curcumina que puede tener un efecto sinérgico al ser utilizado como fotosensibilizador al erradicar microorganismos patógenos que se transmiten por medio de los alimentos. El sistema curcumina-TiO, NPs fue caracterizado mediante espectroscopia UV-Vis, espectroscopia de fotoluminiscencia y fluorescencia, difracción de rayos X y FTIR, encontrando un enlace efectivo entre las TiO2 NPs y la curcumina.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NANOPARTÍCULAS MAGNÉTI-CAS FUNCIONALIZADAS CON CURCUMINA

Andrés F. Cañón Ibarra a, Cristian C. Villa a, Diana Blach a*.

^a Programa de Química. Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías. Universidad del Quindío. Armenia. Colombia * Autor de correspondencia: dblach@uniquindio.edu.co

Palabras Claves: Nanomateriales; nanopartículas magnéticas; curcumina; magnetismo,

La necesidad de implementar procedimientos específicos para el tratamiento de diferentes enfermedades lleva al diseño y aplicación de sistemas que proporcionen una dosificación controlada de sustancias activas y sistemas de dirección localizada; por esto se estudian distintos métodos para proporcionar un ataque localizado, que permite utilizar dosis menores, dentro de estos se encuentra la implementación de Nanopartículas Magnéticas (MNPs) de óxidos de hierro. Las cuales poseen diferentes características como su movilidad controlada utilizando un campo magnético externo (alterno o continuo), baja toxicidad, ser fácilmente funcionalizadas con moléculas que poseen actividad biológica, como la curcumina (droga modelo), estas propiedades convierten las MNPs en un vehículo eficiente, de gran importancia e impacto, frente a la necesidad de obtener metodologías para la liberación de sustancias. En este trabajo se evalúa la capacidad de liberación de la droga modelo unida a MNPs de óxidos de hierro; obtenidas por métodos de sonicación siendo este un método de síntesis amigable con el medio ambiente, estabilizadas en una matriz polimérica de quitosano, utilizando un campo magnético continuo, La caracterización del sistema MNPs-curcumina se llevó a cabo mediante espectroscopia UV-Vis, FTIR y DRX. De igual manera se realizaron medidas de las propiedades magnéticas de estos sistemas con el fin de determinar el efecto de la inclusión de la curcumina sobre las misma

PRESSURE-INDUCED FERROELECTRIC BEHAVIOR IN THE BAWO, OXIDE

Luis Mesa a, C. J. Páez a, A. C. García Castro b*

^a School of Physics, CIMBIOS Research group, Universidad Industrial de Santander, Carrera ²⁷ Calle ⁹, ⁶⁸⁰⁰⁰², Bucaramanga, Colombia.

^b School of Physics, FICOMACO Research group, Universidad Industrial de Santander, Carrera ²⁷ Calle ⁹, ⁶⁸⁰⁰⁰, Bucaramanga, Colombia

* Corresponding Author: acgarcia@uis.edu.co

Keywords: Ferroelectrics; density functional theory; oxides; layered materials.

Interestingly, layered BaMF₄ fluorides have been highlighted as potential multiferroics with a very high Curie temperature above 1000 K [1,2]. Unfortunately, the experimental synthesis process for such materials is quite expensive and dangerous due to the fluorine laboratory management. Then, counterparts within the oxide's family, ABO₄, might be ideal candidates for such applications. Nevertheless, very few oxide materials within the ABO₄ stoichiometric relationship are known. Therefore, and based-on an experimental report claiming for the existence of a polar phase under pressure in the BaWO₄ material [3], we have theoretically investigated the stability and the polar state on this Tungsten-based oxide. We found, by means of first-principles calculations, that in fact the BaWO oxide holds the Cmc2, phase under pressure with a polarization close to 10 μC/cm². Additionally, by computing the Born-effective charges, we confirmed the geometrically-driven ferroelectric character of this material.

- [1] C. Ederer and N. Spaldin, Phys. Rev. B 74, 1 (2006).
- [2] A. C. Garcia-Castro, W. Ibarra-Hernandez, E. Bousquet, and A. H. Romero, Phys. Rev. Lett. 121, (2018).
- [3] D. Errandonea, J. Pellicer-Porres, F. J. Manjón, A. Segura, C. Ferrer-Roca, R. S. Kumar, O. Tschauner, J. López-Solano, P. Rodríguez-Hernández, S. Radescu, A. Mujica, A. Muñoz, and G. Aquilanti, Phys. Rev. B, 73, 1 (2006).



A- AND B-SITES EFFECT IN THE FERROELECTRIC BEHAVIOR OF ABF, MATERIALS

Juan S. Espitia a, C. J. Páez a, A. C. García Castro b*.

^a School of Physics, CIMBIOS Research group, Universidad Industrial de Santander, Carrera ²⁷ Calle ⁹, ⁶⁸⁰⁰⁰², Bucaramanga, Colombia.

^b School of Physics, FICOMACO Research group, Universidad Industrial de Santander, Carrera ²⁷ Calle ⁹, ⁶⁸⁰⁰⁰², Bucaramanga, Colombia.

* Corresponding Author: acgarcia@uis.edu.co

Palabras Claves: Ferroelectrics; density-functional theory; fluorides; layered materials.

Very recently, layered materials have attracted a lot of attention based-on their possibility to hold a strong polar ferroelectric state on top of a magnetic ordering [1,2]. Thus, studies focused on the possible tuning of their polar state can shed light into the enhancement of their properties with the aim to highlight such materials as potential candidates for future applications. Therefore, here we present the study of the ferroelectric properties in the ABF_4 materials with A = (Sr, Ba) and B = (Mg, Zn). This theoretical study was performed based-on first-principles calculations within the density-functional theory, DFT, formalism. We found that the geometric ferroelectricity in ABF_4 layered compounds can be tuned by changing the A-site with Sr and Ba cations and B-sites with Mg and Zn elements. Additionally, we studied the stability of the phases as a function of the A and B cations' occupation preference observing a layer-by-layer disposition, as a ground state, when the A-site has different compositions of Sr/Ba. We hope that these results will open a synthesis route, to experimentalist and theoreticians, for the possible enhancement of the ferroelectric behavior in this type of materials through atomic substitution.

[1] A. C. Garcia-Castro, W. Ibarra-Hernandez, E. Bousquet, and A. H. Romero, Phys. Rev. Lett. 121, (2018).

[2] N. A. Benedek, J. M. Rondinelli, H. Djani, P. Ghosez, and P. Lightfoot, Dalt. Trans. (2015).

OBTENCIÓN, ESTUDIOS ESTRUCTURALES Y MAGNÉTICOS DE NA-NOPARTÍCULAS DE ÓXIDOS DE HIERRO CON PROPIEDADES BIO-**COMPATIBLES**

Julián A. Manrique Ramírez a, William A. Suikan Bustamante a, Francy N. Jiménez García a,b, O. Moscoso Londoño a*. ^a Departamento de Física y Matemáticas, Universidad Autónoma de Manizales, Colombia. ^b Departamento de Física y Química, Universidad Nacional de Colombia, Colombia. * Autor de correspondencia: oscar.moscosol@autonoma.edu.co

Palabras Claves: Nanopartículas magnéticas; magnetita, biocompatibilidad, funcionalización.

En este trabajo se presentan en detalle los protocolos para la síntesis de nanopartículas de óxidos hierro (Fe₂O₄). Se seleccionó el método de coprecipitación y se estableció un control sobre diversos parámetros en la síntesis con el fin de obtener sistemas de nanopartículas con características particulares y garantizar su reproducibilidad bajo condiciones específicas. Para este trabajo se sintetizaron cinco (5) muestras de nanopartículas de magnetita, en las cuales se establecieron como parámetros de control la temperatura, el pH de la solución básica y la presencia o no del agente funcionalizador (en este caso ácido cítrico). Los estudios de biocompatibilidad se realizaron con plasma rico en plaquetas. Los resultados indican una fuerte dependencia de la biocompatibilidad con el tamaño de las nanopartículas y con el estado de agregación de éstas en el ferrofluido. Así mismo, se evidencia que el recubrimiento con ácido cítrico no solo sirve como como agente funcionalizador o estabilizador, sino que también confiere propiedades de biocompatibilidad al sistema de nanopartículas. Las propiedades estructurales de las muestras en estudio fueron evaluadas mediante difracción de rayos X y microscopia electrónica, mientras que las propiedades magnéticas fueron estudiadas a través de curvas de magnetización en función de campo y temperatura. Con estos resultados se concluyó que el estado de agregación del sistema se ve fuertemente afectado por el agente funcionalizador y así mismo sus propiedades físicas.



EFECTO DE LA CONCENTRACIÓN DE PLATA ADICIONADA A NANOPARTÍCULAS DE DIÓXIDO DE TITANIO INOCULADAS EN SEMILLAS DE ESPINACA (SPINACIA OLERACEA L)

Fernando Gordillo Delgado ^a, Daniel F. Casas Castañeda ^a, <u>Ana M. Restrepo Pineda</u> ^{a*}

a Grupo de Investigación en Ciencia Aplicada para el Desarrollo de la Ecorregión-GICADE; adscrito al Instituto Interdisciplinario de las Ciencias, Universidad del Quindío, Colombia.

* Autor de correspondencia: amrestrepop@uqvirtual.edu.co

Palabras Claves: Fitonanotecnología; nanopartículas; espinaca; razón de evolución de oxígeno (REO); fotosíntesis.

El dióxido de titanio (TiO₂) es un semiconductor que absorbe radiación electromagnética en la región del UV y es usado como fotocatalizador para degradar moléculas orgánicas; su fotoactividad se puede alcanzar con luz visible, mediante el dopaje con un metal que también puede hacer la función de relevador para evitar la recombinación de portadores en la superficie y aumentar la eficiencia fotocatalítica; en particular, la plata tiene alta conductividad eléctrica, estabilidad química y actividad antimicrobiana, por lo que resulta un buen candidato para la impurificación del TiO₂, si se desea usar para éste último tipo de aplicaciones. Por otro lado, entre los productos alimenticios la espinaca ocupa un lugar sobresaliente por ser una hortaliza con valiosos aportes nutricionales de vitamina A, B1 y C; sin embargo, hay poca información técnica sobre el manejo local de enfermedades y pestes que lo afectan, así como de la forma óptima de fertilización. En este trabajo se evaluó la inoculación de semillas de Spinacia oleracea l con TiO, en polvo nanoparticulado, al que se incorporó Ag (TiO,-Ag) durante su síntesis por el método Sol-Gel y tratamiento térmico. La caracterización estructural de este material se hizo mediante difracción de rayos X y microscopia electrónica de barrido y las plántulas fueron sembradas en un medio hidropónico; se midieron parámetros morfológicos y de fitotoxicidad y con la técnica fotoacústica se monitoreó la actividad fotosintética. Las NPs de TiO2Ag de tamaño 10±2 nm, suspendidas en agua a una concentración de 0.25 %, se aplicaron a las semillas y los datos obtenidos se analizaron en función de la cantidad de plata adicionada (0.25, 0.50 y 0.75 %).

MODELO LEGO – ARDUINO PARA ILUSTRAR LOS PRINCIPIOS BÁSICOS DE LA MICROSCOPÍA DE FUERZA ATÓMICA EN ESTUDIANTES DE SECUNDARIA

Carlos A. Rosero Zambrano *a, Brayan S. Tello a, Fabián Urbano a.

^a Centro Sur Colombiano de Logística Internacional, SENA, Colombia *Autor de correspondencia: <u>caroseroz071@misena.edu.co</u>

Palabras Claves: Microscopía de Fuerza Atómica; LEGO bricks; arduino;

La Microscopía de Fuerza Atómica (AFM) es uno de los instrumentos más importantes disponibles actualmente para la obtención de imágenes topográficas a escalas micro y nanométrica a partir de una sonda de barrido. Este permite no solo la caracterización sino también la manipulación de la materia y la exploración de interacciones mecánicas, eléctricas, magnéticas y electroquímicas entre la sonda de barrido del microscopio y la muestra bajo con aplicaciones en ciencia de los materiales. Debido al número creciente de aplicaciones derivadas de la investigación utilizando AFM surge como necesidad la comprensión los principios básicos de la Microscopía de Fuerza Atómica a todos los niveles académicos incluyendo secundaria, puesto que apropiar conocimientos científicos en esta etapa desempeña un papel importante en el proceso de aprendizaje de los estudiantes que permite inspirar a la próxima generación de científicos y preparar futuros profesionales con competencias en nanociencia. El plan de estudios del nivel de secundaria se basa en los fundamentos tradicionales de disciplinas como la química, la física y la biología, pero para resolver la falta de conocimientos en nanociencia e introducir conceptos básicos de esta área, se desarrolló un modelo macroscópico de un Microscopio de Fuerza Atómica desde el concepto de diseño hasta su implementación práctica del modelo realista y funcional. El modelo macroscópico AFM se desarrolló utilizando ladrillos LEGO, tarjetas de desarrollo Arduino y piezas electrónicas y mecánicas de fácil acceso por estudiantes, el cual permitió obtener mapas de interacción magnética a través de imanes ubicados en la sonda y la superficie de la muestra analizada que simulan las fuerzas interatómicas e intermoleculares presentes entre la sonda de barrido del AFM real y la superficie de la muestra; como resultado de esta interacción en ambos casos se construye un mapa en tres dimensiones proporcional a la interacción resultante. En el desarrollo de este modelo los estudiantes de secundaria fortalecieron sus competencias STEM (Science Technology Engineering and Mathematics) a la vez que comprenden conceptos e instrumentación básica relacionada con la nanociencia y la Microscopía de Fuerza Atómica.



SIMULACIÓN DE MICROSCOPÍA DE FUERZA DE PIEZORESPUESTA POR EXCITACIÓN DE BANDAS (BE-PFM), DETECCIÓN DE RUIDO Y CORRIMIENTO EN LA FRECUENCIA DE RESONANCIA A TRAVÉS DE LA DESCOMPOSICIÓN EN VALORES SINGULARES (SVD)

Carlos A. Rosero-Zambrano a*, Brayan S. Tello a, Fabián Urbano a.

^a Centro Sur Colombiano de Logística Internacional, SENA, Colombia *Autor de correspondencia: carosero071@misena.edu.co

Palabras Claves: Microscopía de fuerza de piezorespuesta, singular value.

La Microscopía de Fuerza de Piezorespuesta es una técnica que permite probar el acople electromecánico a nanoescala, basado en la respuesta detectada a través de una sonda de prueba de unos pocos nanómetros de radio y polarizada con un voltaje eléctrico alterno a una frecuencia definida, y en contacto con materiales piezoeléctricos y ferroeléctricos. En los últimos años se han desarrollado técnicas basadas en métodos multifrecuencia tales como *Dual AC Resonance Tracking* (DART) y *Band Excitation Piezoresponse Force Microscopy* (BE-PFM) que mejoran considerablemente la fiabilidad de los resultados.

En este trabajo, se desarrolló un modelo numérico basado en un oscilador armónico simple (SHO) para correr una simulación y generar un conjunto artificial de datos que reproduce el comportamiento observado en los datos experimentales de BE-PFM. El modelo incluye los siguientes parámetros independientes: amplitud del voltaje y frecuencia de polarización alterna, constante piezoeléctrica inversa, frecuencia de resonancia de contacto y factor de calidad, a partir de los parámetros anteriores se calcula la amplitud para el SHO.

Experimentalmente los datos obtenidos contienen ruido agregado que no depende del acople electromecánico debido exclusivamente a la respuesta de los materiales analizados y se quiere que el ruido sea detectado y en el mejor de los casos eliminado.

Para la detección de niveles de ruido que afectan la respuesta del SHO en BE-PFM se utilizó la Descomposición por Valores Singulares o SVD, el cual es un método de factorización matricial que descompone una matriz en el producto de tres matrices tal que , donde A es la matriz de todos los datos experimentales multi-dimensional proveniente de múltiples SHO definidos por los puntos en los que la sonda de prueba hace contacto con la superficie de los materiales. La detección del ruido se realizó a través de los tres primeros eigenvectores () calculados mediante el computo de la SVD que determina características como: espectro promedio, corrimiento en frecuencia de resonancia y ensanchamiento del pico respectivamente.

El uso de SVD demuestra la aplicabilidad métodos de análisis multivariado en ciencia de materiales para la rápida detección y cuantificación de niveles de ruido y variaciones en frecuencia de resonancia en la exploración de materiales piezoeléctricos y ferroeléctricos explorados a nanoescala mediante BE-PFM.

ACOPLAMIENTO DE IR (III) Y FE (II) AL COMPUESTO ARIL TETRA-LIN LIGNANO PODOFILOTOXINA

Joan S. Valencia^a, Andrés M. Rojas^a, Clara J. Durango^{a*}. ^a Universidad Antonio Nariño, Armenia, Colombia * Autor de correspondencia: cdurango@uan.edu.co

Palabras Claves: Podofilotoxina; producto natural; complejo metálico; citotoxicidad.

Como respuesta a la crisis mundial que representa el cáncer, se plantea la obtención de nuevos posibles fármacos aplicables al tratamiento de esta enfermedad, mediante la implementación de Ir(III) y Fe(II) para modificar productos naturales con actividad biológica conocida, como la podofilotoxina. Se ha reportando que los complejos organometalicos de metabolitos secundarios presentan aumentos importantes en la actividad biologica respecto al ligando libre, permitiendo obtener compuestos con características singulares que hagan del posible fármaco una alternativa potente y viable por su actividad anticancerígena aumentada y/o sus efectos secundarios reducidos.

Por otro lado, la podofilotoxina es uno de los productos naturales antimitóticos más representativos. Actualmente, los derivados semisintéticos de podofilotoxina como etopósido, tenipósido y fosfato de etopósido, poseen uso clínico para el tratamiento contra el cáncer. Sin embargo, existen varias limitaciones en su utilización. Estos medicamentos muestran varios efectos secundarios, como la mielosupresión, la neutropenia y las náuseas. La resistencia a los medicamentos también se convirtió en una barrera importante para el tratamiento eficaz, que es un problema común en los procesos terapéuticos contra el cáncer. Es importante mencionar que las características estructurales del lignano podofilotoxina como los anillos aromáticos, los grupos funcionales que contienen oxígeno y algunos enlaces C-H son reportados como indispensables para la actividad biológica que este exhibe, y debido a su papel son objetivos principales de modificación estructural para minimizar la inactivación metabólica.

De acuerdo con lo anteriormente descrito, el presente estudio que se encuentra en desarrollo busca modificar estructuralmente el lignano podofilotoxina mediante reacciones de acoplamiento en atmosfera inerte, empleando técnicas schlenk que permitan la modificación de sitios estructurales importantes por acción de los metales Ir (III) y Fe (II). Los compuestos serán caracterizados mediante IR, RMN y EM.

Los resultados obtenidos hasta el momento sugieren la modificación de la podofilotoxina en los grupos funcionales que regulan su capacidad de ser metabolizada y que determinan su modo de acción al interior del organismo vivo.



ESTUDIO CINÉTICO Y TERMODINÁMICO DE LA DEGRADACIÓN FOTOCATALÍTICA DE LUMINOL UTILIZANDO PUNTOS CUÁNTICOS DE CDSE/ZNS

Margy P. Acevedo a*, Gilma Granados b, Brayan S Gómez b.

^a Universidad Santo Tomás, Facultad de Química Ambiental, sede Bucaramanga, Colombia

^b Universidad Nacional, Facultad de Ciencias, sede Bogotá, Colombia

*Autor de correspondencia: mpacevedog02@gmail.com

Palabras Claves: Puntos cuánticos; fotocatálisis; cinética; termodinámica.

En la presente investigación se efectuó el estudio de la degradación fotocatalítica del luminol utilizando puntos cuánticos (PCs) de CdSe/ZnS con ácido oleico como agente estabilizante. Los PCs se sintetizaron por el método (Gómez Piñeros & Granados Oliveros, 2018). Estos materiales presentaron notables propiedades ópticas como alto rendimiento cuántico de fluorescencia $\Phi_E = 59.7$ % en la región del verde. La degradación del luminol se efectuó mediante la irradiación con luz visible de los PCs y la cinética de la reacción se evaluó por medio del seguimiento de la disminución de la fluorescencia del luminol. Los resultados obtenidos demuestran que en ausencia de los PCs y en presencia de luz visible no hubo degradación aparente del luminol (k = 0), en contraste en presencia de los PCs y luz visible si se evidenció una disminución significativa del luminol (k = 0.696) esto demuestra que el proceso es fotocatalizado por los PCs mediante su activación con luz visible. Adicionalmente, se efectuó una prueba en presencia de manitol como scavenger de •OH, evidenciando una notable disminución en la degradación del luminol (k = 0.092), lo que permite deducir que este proceso es debido a la formación de •OH por los PCs en presencia de luz visible a través de un proceso de transferencia de carga fotoinducida. Por otro lado, la termodinámica de la degradación del luminol se efectuó por voltamperometría cíclica determinando así las energías de los bordes de banda de valencia ($E_{_{BV}}$ = -6.0 eV) y de conducción ($E_{BC} = -4.0 \text{ eV}$) de los PCs. Una vez efectuado el alineamiento de bandas, fue posible corroborar que termodinámicamente a partir de la fotoexcitacion de los PCs con luz visible, se efectúa una transferencia de carga para formar las especies reactivas de oxígeno, encargadas de degradar el luminol. Lo anteriormente descrito permitió evidenciar que la degradación del luminol es un proceso fotocatalítico, en donde la reacción es catalizada cinéticamente por los PCs asistida mediante la irradiación con luz visible para superar la energía requerida para el proceso de transferencia de carga fotoinducida necesario para la generación de las especies reactivas de oxígeno.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE PUNTOS DE CARBONO OBTE-NIDO A PARTIR DE MÉTODOS ECOLÓGICOS

María C. Montañez Moyano a*, Gilma Granados Oliveros b.

a.b Grupo de investigación en Nano Inorgánica, Universidad Nacional de Colombia, Colombia. * Autor de correspondencia: mmontanezm@unal.edu.co

Palabras Claves: Síntesis; caracterización; puntos de carbono; fluorescentes.

Los Puntos de carbono son casi esféricas generalmente de <10 nm de diámetro, poseen diversas características como fluorescencia sintonizable, solubilidad en el agua, facilidad de funcionalización, fotoluminiscencia, alta biocompatibilidad, baja toxicidad, elevada estabilidad fotoquímica y, adicionalmente, su síntesis es sencilla y de bajo costo.

Con respecto a la obtención de estos materiales, tradicionalmente los materiales fluorescentes se han obtenido por medios drásticos generando productos secundarios nocivos al hombre y al medio ambiente, los principios de la química verde juegan un papel importante en este estudio, dado a que se pueden emplear reactivos orgánicos de bajo costo, solventes poco tóxicos y ecológicamente amigables. Se prepararon puntos de carbono por un método de síntesis sencillo a partir de una fruta colombiana en este caso la Uchuva (*Physalis peruviana*) y un solvente orgánico rico en nitrógeno el cual ayuda a potencializar sus propiedades.

Para poder explicar tanto la estructura como sus propiedades ópticas de los puntos de carbono se hace su respectiva caracterización usando los siguientes tipos de análisis: Espectroscopia de absorción UV-vis y fluorescencia, DRX y FT-IR. El rendimiento cuántico de fluorescencia de las nanopartículas se determinó excitando a 360 nm y empleando como estándar sulfato de quinina disuelta en ácido sulfúrico 0.5 M, obteniendo un valor de 6%. El máximo de absorbancia fue de 283 nm, el espectro de emisión de las nanopartículas se midió en un intervalo de 300 nm a 600 nm observando que el máximo de emisión fue de 390 nm.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE ORO CON L-CISTEÍNA

María C. Montañez Moyano a*, María C. Parra Samper a, Gilma Granados Oliveros a.

a Grupo de investigación en Nano Inorgánica, Universidad Nacional de Colombia, Colombia.

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

Palabras Claves: Síntesis; caracterización; nanopartículas de oro; cisteína.

El oro es químicamente estable, se puede sintetizar fácilmente, no es tóxico y es biocompatible. Debido a los efectos del confinamiento cuántico, la densidad de los estados continuos de un metal en masa (tipo volumétrico) se transforma en niveles de energía discretos, un efecto de la misma naturaleza que el que se presenta dentro de los semiconductores. Además, los nanocristales metálicos se caracterizan por sus propiedades de resonancia de plasmón de superficie.

Para la síntesis de las AuNPs vamos a proceder con la reducción del ión [AuCl4] - a Au metálico empleando NaBH4, generándose átomos que actúan como centros de nucleación. Este proceso da lugar a la formación de agregados, cuyo crecimiento continuará con la producción de átomos de oro. El resultado será la precipitación de estos *clusters*, en medio de un ligante del grupo Tiol. Por ello, antes de introducirnos en la síntesis propia de las nanopartículas, debemos agregar el ligante L- cisteína.

Las nanopartículas de oro se obtuvieron preparando una solución 0,1 mM de AuCl₃ con C₃H₇NO₂S (L-cisteína) al 3%, además se prepara una segunda solución 0,2 mM de NaBH4, llevándolas a un baño frio, Pasados los 20 mn llevamos agitación la segunda solución por 5 mn, gota a gota se va agregando la primera solución para su posterior reducción de AuCl₃ a Au, aparece un ligero color pardo rojizo que nos indica que las nanopartículas han aparecido, por un tiempo de 2 horas, se lleva a centrifugación a 8000 rpm para eliminar impurezas y a refrigeración para su posterior caracterización.

Como resultados en de la caracterización, en el espectro UV-VIS se observa el pico más alto de la región visible el cual tiene una absorción máxima de 528 nm. Podemos decir que ha aparecido el plasmon de resonancia característico de las nanopartículas en la región del espectro visible.

El rendimiento cuántico fluorescente de las nanopartículas se determinó en una región de 425 nm, comparando con una solución estándar de sulfato de quinina disuelto con ácido sulfúrico (0,5 M). Obteniendo un rendimiento cuántico del QY = 5%.

NANOCOMPOSITES OF YBCO-BZO AND YBCO-BYTO DEPOSITED ON CZO/YSZ SUBSTRATES FOR COATED CONDUCTORS

Paula A. Garcés a*, Héctor F. Castro a.

a CRYOMAG, Universidad Nacional De Colombia, Bogotá, Colombia * Corresponding author: paug76@gmail.com

Keywords: Nanocomposites; YBCO; BYTO; coated conductors; CZO; YSZ; critical current density.

The production of affordable YBa2Cu3O7-δ (YBCO) coated conductors (CC), for industrial applications, is an extremely challenging issue. Great effort is being devoted to finding simple multilaver architectures, which simultaneously satisfy the following conditions: present an effective oxidation protection for the metallic substrate, an effective chemical barrier to cation diffusion, and a good lattice matching with the substrate and superconducting layer. In this work we report the study of chemical solution deposited (CSD) YBa2Cu3O7-δ nanocomposite thin films, with diluted Ba2YTaO6 (BYTO) and BaZrO3 (BZO) impurity nanoparticles. Films were deposited on YSZ monocrystalline substrates, with a buffer layer of Cerium Zirconium Oxide (CZO), also grown by chemical method. We studied the influence of the buffer layer on superconducting properties of the films, with a secondary phase content of 10%. Films were grown with a temperature treatment consisting on a single step at 770°C. The films were characterized by X-ray diffraction, and T_c and J_c were inductively measured with a SQUID. In all X-rays diffraction patterns, presence of BaCeO3 was observed. It is known that this compound generates reactivity with YBCO, which probably caused the low Jc obtai $ned \sim 1.3 \text{ MA/cm2}$ at 77K.



VARIATION OF STRUCTURAL AND HYPERFINE PARAMETERS OF (FE0.70AL0.30)1-XNBX, WITH X= 0, 0.05, 0.10 AND 0.20 SYSTEM OBTAINED BY MECHANICAL ALLOYING

Ruby R. Rodríguez a*, German A. Perez-Alcazar b, Hernán Colorado b, Ligia E. Zamora b.

a Departamento de Física, Universidad Autónoma de Occidente, Colombia
b Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad del Valle, Colombia.
*Corresponding author: rrodríguez@uao.edu.co

Keywords: FeAlNb system, mechanical alloying, pulvimetalurgy, mössbauer spectrometry.

Fe0.70Al0.30 alloy is a bcc and ferromagnetic phase, being the atoms of Al a magnetic dilutor. In this work, we study the effect of the Nb on the structural and hyperfine behavior when atoms of Nb substitute atoms of Fe or Al in Fe0.70Al0.30 alloy. A nanostructured system of (Fe0.70Al0.30)1xNbx (x = 0, 0.05, 0.10, 0.20, at. %) was obtained by mechanical alloying Fe, Al and Nb powders in a planetary ball mill during 12 h, 24 h and 36 h milling, and a ball mass to powder mass relation of 10:1. The magnetic and hyperfine properties of the samples were studied by X-ray diffraction (XRD) and Mössbauer Spectrometry (MS) at room temperature, respectively. The X-ray diffraction patterns for x=0 showed the α -FeAl structure and its lattice parameter is approximately constant with milling times ($\sim 2.91 \text{ Å}$). For x=0.05, 0.10 and 0.20 the patterns showed a coexistence between the α -FeAl, Nb(Fe,Al)2 structural phases with an amorphous component. This ratio remains constant with the milling time, while the last two phases increase when Nb increases. The Mössbauer spectra of x=0 samples were fitted using hyperfine magnetic field distributions (HMFDs), its mean hyperfine field (MHF) obtained was 23.4 T, 24.2 T and 24.3 T for 12 h, 24 h and 36 h of milling time, respectively, which correspond to the α -FeAl structure. The spectra of the samples with x=0.05 and 0.10 were fitted using a model with two components, the first one is a HMFD distribution attributed to the α -FeAlNb structure and the second with two doublets attributed to the Nb(Fe,Al)2 structure. Their MHF obtained were 24.5 and 16.9 T, respectively for 36 h. When atomic percentage of Nb increases up to 20 at % the ferromagnetic behavior is diluted due to substitution of Fe-atoms by Nb and Al atoms in the α-FeAl structure. The magnetic behavior becomes paramagnetic at x=0.20, the spectra were fitted with three doublets, one of them related with α-FeAlNb structure and the others with the Nb(Fe,Al)2 structural phase. The adding of Nb in Fe0.70Al0.30 destroyed the magnetism due to replace of atoms of Fe by Nb and generate an amorphization into the system.

SÍNTESIS DE NANOPARTÍCULAS DE PLATA DEPOSITADAS IN-SITU EN DISILICATO DE LITIO PARA SU USO COMO CATALIZADOR

<u>Julieth Rocío Castañeda Pinto</u> a*, Daniel Jáuregui Gómez^b, Mario Palomar^b, Alberto Gutiérrez^b, Angélica M. Candela Soto a. a Grupo de Investigación en Nuevos Materiales y Energías Alternativas GINMEA, Facultad de Química Ambiental, División de Ingenierías y Arquitectura, Universidad Santo Tomás-Bucaramanga, Colombia b Grupo de investigación en nanomateriales, Facultad de Ingeniería en Nanotecnología, Universidad de Guadalajara, Guadalajara, México. * Autor de correspondencia: <u>Julieth.castaneda@ustabuca.edu.co</u>; <u>angelica.candela01@ustabuca.edu.co</u>

Palabras Claves: Eutrofización; compuestos recalcitrantes; nanopartículas de plata; disilicato de litio; actividad catalítica; p-nitrofenol.

El agua cumple un papel importante en la industria como materia prima en sus procesos y medio de remoción de sus residuos, provocando una disminución en las características del recurso hídrico. Entre las industrias presentes en Colombia, el sector textil genera una serie de problemas ambientales por la carga de colorantes utilizado en el área de teñido. El p-nitrofenol es uno de los principales colorantes responsables de efectos nocivos en el agua porque producen su eutrofización, formación de compuestos recalcitrantes y la disminución del oxígeno disuelto (OD). En este trabajo de investigación, se realizó la síntesis de tres modelos de nanopartículas de plata (AgNPs) depositadas in situ en disilicato de litio para evaluar su actividad catalítica en la reducción del p-nitrofenol (4NP) con borohidruro de sodio mediante espectrofotometría Al finalizar la cinética de la reacción de hidrogenación, se realizó un IR a la solución catalizada, donde se observó un pico característico del estiramiento del enlace O-H en 3500, junto con un pico de tensión asimétrico del enlace N-H a 3000cm⁻¹, representando la presencia del p-Aminofenol (4AP). Lo anterior se confirmó comparando el IR obtenido con el IR reportado en la literatura del (4AP). Además, se pudo observar que las nanopartículas reducen el (4NP) en un tiempo de 5 a 10 min, debido a que con la técnica DLS se comprobó que las NPs son monodispersas y tienen un radio hidrodinámico promedio de 15nm. Esto incrementa la velocidad de reacción, lo que indica que las AgNPs son una alternativa para la descomposición de compuestos recalcitrantes del agua.



ACTIVIDAD FOTOCATALÍTICA DE PELÍCULAS DE TIO, DOPADAS CON NO METALES UTILIZANDO LA TÉCNICA SOL-GEL

Daniela M. Calderón a*, William Vallejo a, Carlos Díaz a.

^a Universidad del Atlántico, Colombia

* Autor de correspondencia: dcalderon@mail.uniatlantico.edu.co

Palabras Claves: POA's; catálisis heterogénea; TiO,; dopaje con no metales; azul de metileno.

El dióxido de titanio (TiO₂) es un semiconductor muy estable física y químicamente, además es un material abundante e inocuo para la naturaleza, actualmente es uno de los fotocatalizadores más empleados para degradar moléculas orgánicas en procesos de purificación de agua y aire. En este trabajo se utilizó el método Sol-Gel para sintetizar dióxido de titanio dopado con no metales a partir de tetraisopropóxido de titanio con urea; posteriormente los materiales se soportaron como películas delgadas sobre vidrio utilizando la técnica de Doctor Blade. Los materiales se caracterizaron empleando diferentes técnicas analíticas como RAMAN y DRX, Por último, se pretende evaluar la actividad fotocatalítica de los materiales obtenidos por medio del estudio de degradación de azul de metileno. La figura 1 muestra el espectro Raman de películas de TiO₂, la figura 1 muestra señales característicos de los modos de simetría de vibración para la fase anatasa indicados: E₁ para las señales localizadas a 144 cm⁻¹, 398 cm⁻¹ y 520 cm⁻¹, y E_{3g} para la señal localizada a 639 cm⁻¹, asignaciones que se corresponden con las reportadas en la literatura.

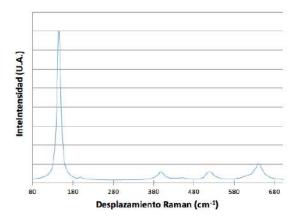


Figura 1. Espectro Raman de películas sintetizadas de dióxido de titanio

Los resultados indican que el proceso de dopado modifico las propiedades ópticas y estructurales de las películas de TiO₂.

EFFECT OF POTENTIAL, SUBSTRATE AND ALKALINE TREATMENT ON THE CA/P MOLAR RATIO OF CALCIUM-DEFICIENT **HYDROXYAPATITE**

Jimmy A. Morales-Morales a*, Viviana Domínguez-Vélez A. Andrés F. Gualdrón b, Ángel M. Meléndez b.

^a Universidad Santiago de Cali, Cali, Colombia

^b Universidad Industrial de Santander, Santander, Colombia * Autor de correspondencia: jimmy.morales00@usc.edu.co

Palabras Claves: Electrodeposition; hydroxyapatite; coating; bioceramic.

Electrochemical deposition of calcium phosphate on stainless steel and titanium electrodes coated with TiO₂ was studied by means of linear scanning voltammetry. TiO₂ coatings on metal substrates are prepared by the sol-gel dip coating method. The effect of the electric potential, the type of metallic substrate and the alkaline pretreatment were studied. Calcium phosphates were obtained by reducing the nitrate ions to produce hydroxide ions in TiO₂/stainless steel and TiO₂/titanium substrates. During the process without alkaline pretreatment a Ca/P ratio of 1.29 and 1.43 was determined for the coatings obtained in TiO₂/SS at -1.1 and -1.4V, respectively. The alkaline pretreatment of TiO₂/stainless steel and the TiO,/titanium substrates accelerated the formation of calcium phosphates. For the steel substrate and titanium, it showed a low calcium content measured by a Ca/P ratio of 1.28 and 1.47, respectively. The highest amount of Ca and P (Ca/P = 1.5) was observed for the substrates exposed to 1M, 1 h of alkaline treatment that coincides with the highest nano-topographic density with different morphology depending on the metallic substrate used and the Ca/P ratio was different due to the unequal loss of P. The alkali treatment could increase the calcium phosphate content in the coating.



A PRELIMINARY STUDY OF FE OXIDES DOPED WITH BA, CO, CU AND SYNTHESIZED BY POLYMERIZATION WITH CARBOXYLIC ACID

Sandra F. Basante-Delgado ^a, Dalliver González-Vidal ^a, <u>Jimmy A. Morales-Morales</u> ^{a*}, William A. Aperador-Chaparro ^b, Jairo A. Gómez-Cuaspud ^c.

^a Universidad Santiago de Cali, Cali, Colombia
 ^b Universidad Militar Nueva Granada, Bogotá, D.C. - Colombia
 ^c Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia
 * Corresponding author: jimmy.morales00@usc.edu.co

Keywords: Citric acid; ferrite powder; microstructure; combustion synthesis.

In the present work we report the synthesis of Fe oxides doped with Co²⁺, Cu²⁺ and Ba²⁺ cations, using the polymerization with carboxylic acid method in air atmosphere, at 950 °C for 3 hours. The mixture of iron, cobalt, barium and copper salts in the presence of citric acid and an esterification aid such as propylene glycol at pH 7 produced Fe oxides with particle sizes varying between 200 and 277 nm. The effectiveness of the coadjuvant was reported to form the polymer network of the citrate complexes. The percentages of yield obtained were on average 42%. The synthesized Fe oxides were characterized by techniques such as powder X-ray diffraction, evidencing the formation of different phases of Fe oxides and hematite in smaller proportion. The particle size of the synthesized Fe oxides differs significantly when they are doped, with Fe oxide doped with copper having the smallest particle size compared to Fe oxide doped with cobalt. Particles structured in the form of agglomerated platelets. FTIR results indicated that an increase in the amount of substitution ions caused a decrease in vibration frequencies of the Fe-O band at the tetrahedral site due to the substitution of Cu²⁺> Co²⁺ ion heavier than the Fe³⁺ ion in the region tetrahedral. We also performed spectroscopic analyses, RAMAN that showed α-Fe₂O₂ two main signals about 225, and 612 cm⁻¹. Through TGA, the thermal stability of the synthesized ferrites was around 800 °C. The influence of the synthesized Fe oxides samples was explored in the ozonation of a dye of unknown chemical structure. The effect was evidenced by visible ultraviolet spectroscopy technique. The results obtained show that the ink could be decolorized by applying oxidation by ozonation, however, when Fe oxides doped with barium, the discoloration increases when this is doped with copper and cobalt, being higher using this last. The degradation process by ozonation presented in this work, carried out in the presence of Fe oxides doped with barium, copper and cobalt, would constitute an example of technology for the environment.

DE FIBRAS DE FIQUE A NANOMATERIALES FUNCIONALES: HIDROGELES BASADOS EN NANOFIBRAS CELULÓSICAS Y NANOPARTÍCULAS METÁLICAS

Brenda L. Nagles ^a, Eduart A. Gutiérrez-Pineda ^{b*}, Cristian Blanco-Tirado ^b, Marianny Y. Combarizza ^b.

^a Programa de Ingeniería ambiental, Unidades Tecnológicas de Santander, Bucaramanga, Colombia ^b Escuela de Química, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia, ⁶⁸⁰⁰⁰² *Autor de correspondencia: eagutipi@uis.edu.co

Palabras claves: TEMPO; nanofibras; gelación; fique; nanopartículas.

Los nanomateriales basados en celulosa son a menudo preparados a partir de celulosa nativa. A través de la disolución directa de esta, lo cual involucra procesos tediosos y problemas de recuperación de solventes. En este trabajo, se desarrollaron hidrogeles basados en celulosa nanoestructurada preparados mediante gelación de nanofibras de celulosa (NFC) provenientes de fibras de fique (*Furcraea andina*) oxidadas con TEMPO, este proceso de oxidación fue usado para generar superficies cargadas negativamente mediante la adición de grupos carboxilato ([COO-]). El grado de oxidación (DO) y la concentración de COO- fueron valuados mediante titulaciones conductimétricas. Diferentes NFC oxidadas mediante TEMPO con diferentes concentraciones de COO- fueron evaluadas y caracterizadas mediante TEM, SEM, FTIR, DSC. Debido a la fuerte interacción de los grupos COO- y los metales de transición (M²+). Las NFC obtenidas, cargadas en la superficie negativamente con grupos COO-, fueron empleadas como matrices para la nucleación y crecimiento de nanopartículas metálicas (NPs) de F₃O₄ y MnO₂. La morfología y propiedades espectroscópicas de los nanocompósitos obtenidos en forma de hidrogeles, películas y xerogeles se evaluaron mediante, SEM, FTIR, DSC y XPS. Los nanocompósitos NFC/NPs M²+, están siendo evaluados en procesos avanzados de oxidación de contaminantes (colorantes) en aguas residuales industriales.



ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES, MORFOLÓGICAS Y ELÉCTRICAS DE PELÍCULAS DELGADAS DE CEO₂ DOPADAS CON ND DEPOSITADAS POR PULVERIZACIÓN CATÓDICA ASISTIDA POR RADIOFRECUENCIA

Luisa F. Suarez^a, John E. Ordoñez^a, Sumitra Sulekar^b, L. A. Rodríguez^{c,d}, Wilson Lopera^a, María E. Gómez^a,

Juan C. Nino b.

^a Grupo de Películas Delgadas, Departamento de Física, Universidad del Valle ^b Universidad de Florida, Gainesville, Florida, USA

^c Departamento de física, Universidad del Valle^d CEMES-CNRS ²⁹, rue Jeanne Marvig, B.P. ⁹⁴³⁴⁷, F-³¹⁰⁵⁵ Toulouse Cedex,

* Autor de correspondencia: <u>luisa.suarez@correounivalle.edu.co</u>

Palabras clave: Celdas de combustible de óxido sólido; películas delgadas; óxido de cerio dopado con neodimio.

La operación a altas temperaturas (HTO ~ 800°C) de celdas de combustible de óxido sólido (SOFC's) ha sido uno de los principales limitantes en la implementación de estos dispositivos en una variedad de aplicaciones prácticas que van desde electrónica portátil a grandes generadores. Además, la HTO implica tiempos de inicio más largos y requiere el uso de componentes más costosos. Para abordar esto, el desarrollo de SOFC basados en electrolitos que pueden operar a temperaturas más bajas, como los electrolitos basados en óxido de cerio, es de interés significativo; Además que menores temperaturas operativas también implican menores costes operativos [1 - 4]. Se depositaron películas de Nd_{0.1}Ce_{0.9}O₂γ (NDC) sobre sustrato de Pt/TiO₂/SiO₂/Si, mediante la técnica de pulverización catódica asistida por RF con una temperatura de sustrato de 550 °C, en una atmósfera de oxígeno puro. Las películas obtenidas presentaron espesores de 49 a 327 nm y se realizaron estudios estructurales, morfológicos y eléctricos. Las medidas de difracción de rayos X por incidencia rasante revelaron que las películas de NDC presentaron naturaleza policristalina con una estructura tipo fluorita cúbica, sin presencia de otras fases. Se utilizó microscopía electrónica de transmisión de alta resolución (HRTEM) para estudiar la orientación cristalográfica de las películas, análisis de espectroscopia de dispersión de energía (EDS) para evaluar la estequiometría de las películas, microscopía de fuerza atómica (AFM) para estudiar la microestructura de la superficie y la rugosidad de las películas. Las propiedades eléctricas de las películas se analizaron utilizando mediciones de conductividad iónica a bajas temperaturas (<150 ° C) para los diferentes espesores.

- [1] G. Baure et al., Phys. Chem. Chem. Phys., Vol. 17, no. 18, págs. 12259 12264, 2015.
- [2] B. Steele et al., J. Mater. Sci., Vol. 36, no. 5, págs. 1053 1068, 2001.
- [3] E. D. Wachsman et al., Science, vol. 334, no. 6058, pág. 935 LP-939, Nov. 2011.
- [4] J. Peña-Martínez et al., Fuel Cells, vol. 8, no. 5, pp. 351-359, 2008.

NANOPARTÍCULAS SINTETIZADAS A PARTIR DE ÓXIDOS METÁLICOS FUNCIONALIZADOS CON LIGANTES QUIRALES

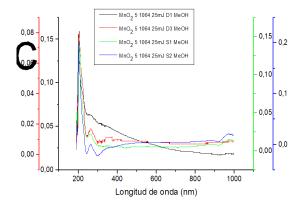
Jhonatan Corrales ^a, Henry Riascos ^a, Yenny P. Ávila ^{b*}.

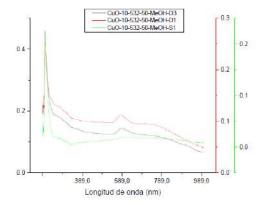
^a Plasma, Laser y aplicaciones, Universidad tecnológica de Pereira, Colombia

^b Grupo de investigación QUIBIO, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad Santiago de Cali, Cali, Colombia
*Autor de correspondencia: yennytorres@usc.edu.co

Palabras Claves: Nanopartículas; óxidos metálicos; ligantes quirales; ablación laser; bactericida.

Las infecciones nosocomiales (INS) reducen la calidad de vida de pacientes que ingresan al sistema de salud, al prolongarse la estadía del paciente se generan costos elevados por parte de las entidades prestadoras de salud. En este trabajo de investigación los autores desarrollaron nuevos materiales potencialmente bactericidas, a partir de nanopartículas obtenidas con el método de ablación láser y funcionalizando el sistema con ligantes quirales derivados de aminoácidos (aminoalcoholes y aminoesteres): Estos nuevos materiales pueden ser reconocidos a nivel celular, al sinergizar dos propiedades físicas las magnéticas y las ópticas. A nivel experimental se sintetizaron NP de los óxidos metálicos de cobre(II), cobalto(II) y manganeso(II), posteriormente se funcionalizaron en la superficie con L- Prolina (aminoácidos quirales), depositándolas sobre dos sustratos poliméricos: poliuretano y polietileno por el método de exfoliación. Los resultados muestran efectos significativos en el plasmón asignado para cada oxido metálico, en función del tiempo, la energía, la longitud de onda del láser, el tiempo de pulsado y la concentración del ligante quiral; como se muestra para MnO₂ y CuO en la siguiente figura; lo cual sugiere un comportamiento diferencial en las propiedades microbiológicas.







EXTRACCIÓN DINÁMICA DE HIDROCARBUROS AROMÁTICOS POLINUCLEARES USANDO UNA INTERFACE ON-LINE HPLC/SPME

Luis M. Polo Díez a, Mohamed N. Kayali Sayadi a, Jhon J. Ríos Acevedo b*. ^a Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, España ^b Facultad de Ciencias Básicas, Universidad Santiago de Cali, Colombia * Autor de correspondencia: jhon.rios04@usc.edu.co

Palabras Claves: SPME-HPLC-FLD; interfaz SPME-HPLC; hidrocarburos aromáticos polinucleares; extracción dinámica por HPLC-SPME.

Este estudio describe la determinación de los hidrocarburos aromáticos polinucleares (PAHs) en agua utilizando una nueva modificación para la interfaz comercial de SPME-HPLC que incorpora una extracción dinámica de SPME-HPLC y vibración en la cámara de desorción durante los pasos de extracción y desorción.

Los parámetros de extracción y desorción se investigaron utilizando catorce PAHs de diferentes volatilidades (naftaleno, acenaftaleno, fluoreno, fenantreno, antraceno, fluoranteno, pireno, benzo (a) antraceno, criseno, benzo (b) fluoranteno, benzo (k) fluoranteno, benzo (a) pireno, dibenzo (a, h) antraceno, benzo (g, h, i) perileno) como compuestos test y detección fluorimétrica.

Se encontraron coeficientes de regresión cercanos a 0.99 con RDS <8.1% y límites de detección en el rango de 0.004-0.59 µg / L. Se aplicó la métodologia implementada para determinar los catorce PAHs en muestras de agua. Los resultados se compararon con el método de 550.1 EPA en el nivel de confianza del 95%, no encontrando diferencias significativas entre ambas metodologías.

IX SIMPOSIO DE QUÍMICA APLICADA (IX SIQUIA) Y I CONGRESO INTERNACIONAL DE NANOQUÍMICA, NANOFÍSICA Y NANOMEDICINA (I CINNN)

FUNCTIONALIZATION OF MAGNETITE NANOPARTICLES WITH CARBOXYMETHYL CELLULOSE AND ETHYL CELLULOSE FOR DEWATERING OF COLOMBIAN CRUDE OILS

Oscar H. Piñeres a*, Jorge H. Sánchez a, Hader H. Alzate a.

^a Pulp and Paper Research Group, Universidad Pontificia Bolivariana, Colombia * Corresponding author: <u>oscar.pineres@upb.edu.co</u>

Keywords: Magnetic nanoparticles; emulsion; demulsification; carboxymethyl cellulose; ethyl cellulose.

One of the main challenges in oil production is formation of undesirable emulsions. These are generated due to the following reasons: flow through porous media such as reservoir pores, shearing within choke valves, pressure drop arising from pumping process and deliberate injection of water, surfactants, alkali and/or polymers. The emulsions of most interest in the petroleum industry are water-in-oil (W/O) emulsions, where the continuous phase is crude and the dispersed phase is water. These are thermodynamically unstable, kinetically stable and may remain unchanged for a long period.

The presence of water in the oil causes problems such as: (a) increased pumping or transporting costs, (b) installation of supplementary equipment to produce export-quality crude oil, (c) corrosion of pumps, pipes and distillation columns due to the existence of chloride ions in aqueous phase, (d) poisoning of refinery catalysts and (e) increased crude oil viscosity due to small dispersed water drops in the crude oil. Therefore, it is necessary to separate the dispersed and continuous phases of emulsions and remove the water.

Demulsification is a process that consists in separating the immiscible phases forming the emulsion. The most widely used technique in the oil industry is chemical demulsification. It uses commercial demulsifiers such as polymeric surfactants, ionic liquids and nanoparticles. These demulsifiers gradually replace the emulsifiers within the water-oil interfacial film and decreasing interfacial viscosity and elasticity.

In this research, we study the feasibility of using carboxymethyl cellulose and ethyl cellulose coated magnetite nanoparticles for dewatering of Colombian crude oils, which is of vital importance for transport and further processing of crude oil. These nanoparticles were synthesized by chemical coprecipitation method, which involves adding ammonium hydroxide to a mixture of two aqueous solutions of ferrous salts at a high temperature. Next, the nanoparticles were functionalized with carboxymethyl cellulose and ethyl cellulose. Finally, we check the demulsifying performance of nanoparticles in a diesel-water model emulsion. It is important to highlight the fact, that dewatering of Colombian crude oils will be made later. In conclusion, carboxymethyl cellulose and ethyl cellulose coated magnetite nanoparticles are magnetically responsive and interfacially active. These destabilized the emulsion, absorbed emulsified water and leaded to rapid separation by an external magnetic field.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE ORO CON L-GLUTATIÓN PARA LA DETECCIÓN DE MERCURIO

María C. Parra Samper a*, Gilma Granados Oliveros a.

a Grupo de investigación en Nano Inorgánica, Universidad Nacional de Colombia, Colombia * Autor de correspondencia: macapasa21@gmail.com

Palabras Claves: Síntesis; caracterización; nanopartículas; glutatión; mercurio.

El efecto óptico de las nanopartículas de oro se aprovechará para el desarrollo de nuevos materiales con habilidad para detectar mercurio a simple vista. Estos materiales pueden prepararse por métodos sencillos, con ligandos en la superficie que pueden coordinarse con el mercurio generando cambios en los espectros de absorción y fluorescencia como respuesta positiva al mercurio.

Para la síntesis de las AuNPs vamos a proceder con la reducción del ión [AuCl₄] - a Au metálico empleando NaBH4, generándose átomos que actúan como centros de nucleación. Este proceso da lugar a la formación de agregados, cuyo crecimiento continuará con la producción de átomos de oro. El resultado será la precipitación de las nanopartículas de oro, en medio de un ligante del grupo Tiol que será la L- Glutatión.

Como resultados de la caracterización, en el espectro UV-VIS se observa que las nanopartículas se encuentran en la banda de la región visible el cual tiene una absorción máxima de 525 nm, el cual nos indica la aparición del plasmon de resonancia característico de las nanopartículas semiconductoras. La caracterización de las propiedades ópticas de las nanopartículas de oro se llevará a cabo con los siguientes análisis: UV-VIS, FT-IR, DRX y Fluorescencia.

Para la detección de Mercurio Hg^{+2} , se preparo una solución madre de $0.05\mu M$, para realizar una curva de AuNPs y Hg⁺² de 0.001μM, 0.002μM, 0.003μM 0.004μM y 0.005μM, así mismo se llevaron a caracterización por fluorescencia, detectando el punto más alto en 415 nm solo las AuNPs, con el acoplamiento del mercurio estas tuvieron una disminución considerable de la intensidad vs longitud de onda. Se evaluará el límite de detección del mercurio con una curva de calibración para validar el método

SÍNTESIS VERDE ASISTIDA POR MICROONDAS DE PUNTOS DE CARBONO A PARTIR DE MARACUYÁ

María C. Parra Samper a*, María C. Montañez Moyano a, Gilma Granados Oliveros a.

a Grupo de investigación en Nano Inorgánica, Universidad Nacional de Colombia, Colombia. * Autor de correspondencia: mmontanezm@unal.edu.co

Palabras Claves: Síntesis; microondas; puntos de carbono; maracuyá.

La investigación intensiva se ha concentrado en la síntesis de Puntos de Carbono o Carbon Dots fotoluminiscentes benignos. Las rutas comunes para preparar nanopartículas de carbono son por medios drásticos generando productos secundarios nocivos al hombre y al medio ambiente, los principios de la química verde juegan un papel importante en este estudio, dado a que se pueden emplear reactivos orgánicos de bajo costo, solventes poco tóxicos y ecológicamente amigables

Se propone una ruta de síntesis de microondas fácil, económica y verde de un solo paso hacia puntos de carbono fotoluminiscentes. La preparación requiere de Maracuyá (Passiflora edulis) como el precursor de carbono y una pequeña cantidad de un solovente orgánico como es la etielendiamina, y puede terminar en solo unos minutos, no se necesita reactivo de pasivación de la superficie. Los puntos de carbono son biológicamente compatibles y muestran propiedades ópticas favorables y tienen aplicaciones potenciales en bioetiquetado y bioimagen, procesos de oxidación avanzada, desinfección fotocatálitica, terapia fotodinámica y detección de contaminantes.

Los materiales se caracterizarán por diferentes técnicas espectroscópicas: Difracción de Rayos X (DR-X), micrografía de trasmisión electrónica (TEM), Espectroscopia infrarroja (FT-IR), Espectroscopia fotoelectrónica de rayos X (XPS), y se medirán propiedades ópticas como los espectros de absorción y de fluorescencia.

Como parte de dar algunos resultados de las propiedades ópticas de los puntos de Carbono se concluyó que el máximo de absorbancia fue de 283 nm y el espectro de emisión de las nanopartículas se midió en un intervalo de 300 nm a 600 nm observando que el máximo de emisión fue de 360 nm.



STRUCTURAL AND OPTICAL PROPERTIES OF QUANTUM DOTS OF CDSE/ZNS WITH DIFFERENT COMPOSITION AND THEIR CAPACITY FOR MERCURY DETECTION

Fredy G. Ortiz a*, Gilma Granados a.

^a NanoInorganic Research Group, Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, ¹¹¹³²¹, Bogotá, Colombia *Corresponding author: fgortizc@unal.edu.co

Keywords: Mercury; quantum dots; shell quantity; optical and structural properties.

The quantum dots have physical, chemical and electronic exceptional properties due to the effect of quantum confinement (particles with size between 2 and 10 nm). With this effect, the optical properties depend on their size, the smallest absorb in the ultraviolet and the largest in the infrared. In this work, the effect of mercury detection on the optical properties of four samples of CdSe/ZnS quantum dots with different shell quantity was analyzed. For synthesis, CdSe /ZnS were obtained by the solvothermal method and different molar proportions of shell precursors (0.032, 0.16 and 0.32 mmol of Zn⁺² precursor).

With the increase of the amount of the ZnS layer, the shifts of the absorption and fluorescence bands towards the longer wavelengths were obtained, in terms of the observed fluorescence quantum yields(ϕ) and molar absorptivity coefficients (ϵ) a growth in their value as the amount increases of shell (1.93, 9.45 and 20.24% of the shell respectively) to then have a decay in this value (ϕ : 0.25, 0.83, 0.51 and ϵ : 70846.27, 81150.44, 56047.18 L mol⁻¹ cm⁻¹). The material characterization was developed with FT-IR, DRX and TEM. TEM analysis showed the size of quantum dots is 2.3±0.3 nm; in FT-IR showed the carbonyl band decreased and two bands appear in 1409 and 1540 cm⁻¹ confirming that CdSe-ZnS QDs had been capped by carboxyl group. The QDs exhibited a crystalline structure zinc blende type in ZnS confirming with XRD analysis.

Optical properties CdSe/ZnS quantum dots were tested in mercury detection. In this way, the fluorescence intensity was quenched in presence of Hg²⁺, specifically when the mercury concentration increases in the range 0-5 µM with detection limit 25, 15 and 120 nM respectively. Changes in the optical properties are also observed when the materials interact with different metals ions, when QD interact with Hg⁺² ion produce a fluorescence quenching with other metal ions (Na⁺, Mg⁺², Al⁺³, Pb⁺², Zn⁺², Cd⁺², Cu⁺², Ni⁺², Co⁺², Fe⁺³, Mn⁺², Cr⁺³, Y⁺³ and La⁺³) it's not possible. Those results are very promising for application in environmental and public health problem caused by use of mercury in illegal gold mining.

ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES OPTOELECTRÓNICAS EN MULTICAPAS DE ÓXIDOS DE GRAFENO (MOG) Y MULTICAPAS ÓXIDOS DE GRAFENO REDUCIDOS (MOGR)

Adela A. Pérez a.b.*, Jorge A. Guerra a, Maria E. López a, Ana Champi b.

^a Departamento de Ciencias, Sección Física, Pontificia Universidad Católica del Perú ^b Centro de Ciencias Naturales y Humanas, Universidad Federal del ABC- Brasil. *Autor de correspondencia: aperezc@pucp.edu.pe

Palabras clave: Oxido de grafeno, espectroscopia Raman, propiedades optoelectrónicas, potencia de láser.

En este trabajo se realizó el estudio de la matriz de grafito para obtener multicapas de óxidos de grafeno y multicapas de óxidos de grafeno reducidos térmicamente. Las matrices de Grafito son de la Empresa Nacional de Grafite (Minas Gerais-Brasil), de ahora en adelante llamadas *grafito comercial*, se obtuvieron en la forma de hojuelas pequeñas y finas en el orden de micras. Sobre estas hojuelas fue utilizada la técnica química modificada de Hummer-Offmman para la obtención de óxidos de grafito (OG). A partir de estas matrices utilizamos la exfoliación micro mecánica para obtener multicapas de óxido de grafeno (MOG) las cuales son depositadas sobre substratos de Si/SiO₂. Posteriormente fue construido un dispositivo para inducir variaciones controladas de la temperatura sobre la muestra para obtener las multicapas de óxidos de grafeno (MGOR) y de esta forma hacer un estudio sistemático de los espectros Raman y así evaluar la influencia de la temperatura en el material oxidado y exfoliado. Usamos la técnica de espectroscopia micro Raman para estudiar las propiedades optoelectrónicas de las multicapas (cinco capas), así como, la distancia entre los defectos y el ancho de banda, permitiendo así evaluar las propiedades del óxido de grafito y su calidad. De esta forma, también se estudia el proceso de oxidación y el mecanismo de reducción térmica controlada sobre estos parámetros en las multicapas. Finalmente, se estudió el efecto de la densidad de potencia de la fuente de excitación sobre las propiedades optoelectrónicas de forma sistemática utilizando un láser semiconductor bombeado ópticamente (OPSL) de longitud de onda igual a 532nm.

- [1]. Ferrari, A. C. (2007), Raman spectroscopy of graphene and graphite: Disorder, electron–phonon coupling, doping and nonadiabatic effects
- [2]. Xu Q, Xu H, Chen J, Lv Y, Donge C and Sreeprasade T S. Inorg. (2015) Chem. Front. 2 417.
- [3]. Keith E. Whitener Jr. and Sheehan P E. (2014) Diamond & Related Materials 46 25.







POTENCIACIÓN DEL EFECTO ANTIBACTERIANO DE PÉPTIDOS CATIÓNICOS VEHICULIZADOS DENTRO DE NANO-LIPOSOMAS FUNCIONALIZADOS CON POLÍMEROS

José Oñate-Garzón^a* Stefania Cantor a, Lina Vargas a, Cristhian Yarce b, Constain Salamanca b*.

a Centro de Investigación en Ciencias Básicas Ambientales y Desarrollo Tecnológico, (CICBA),

Universidad Santiago de Cali, Colombia.

b Laboratorio de Diseño y Formulación de Productos Químicos y Derivados, Departamento de Ciencias Farmacéuticas, Facultad de Ciencias Naturales, Universidad Icesi, Colombia * Autor de correspondencia: jose.onate00@usc.edu.co

Palabras Claves: Alyteserin 1c; nano-liposomas; vehículización; Enfermedades transmitidas por alimentos.

Las bacterias son un grupo de patógenos frecuentemente relacionados con las enfermedades transmitidas por los alimentos (ETA), lo cual significa un problema de salud pública a nivel mundial. El propósito de este trabajo, fue contribuir a la solución de este problema mediante el estudio de la actividad antibacteriana frente a dos cepas de interés en el campo de los productos alimenticios, *Listeria* monocytogenes y Escherichia coli. Para esto, se utilizaron dos métodos de manera general: (i) modificación estructural de péptidos antimicrobianos y (ii) nano-vehiculización de los péptidos dentro de liposomas recubiertos con polímero. Primero, se sintetizaron dos péptidos antimicrobianos usando el método de fase sólida por fmoc, el Alyteserin 1c (péptido +2) y un derivado mutante más catiónico e hidrofílico, el péptido +5. Los nanoliposomas se elaboraron mediante el método de invección de etanol y se recubrieron con el polímero catiónico Eudragit E-100 a través del proceso de capa por capa. La caracterización de los liposomas, en términos de tamaño, polidispersidad y potencial zeta, se realizó mediante dispersión dinámica de la luz. Los resultados mostraron que las características fisicoquímicas de los liposomas, cambiaron considerablemente después de la introducción del péptido y del recubrimiento con el polímero. Además, la actividad antibacteriana frente a ambas cepas, cambió modestamente después de modificar la secuencia peptídica. No obstante, después de la encapsulación de los péptidos en nano-liposomas recubiertos con polímero, la actividad antibacteriana aumentó aproximadamente 2000 veces frente la de L. monocytogenes.



EFECTO DEL BIOCONJUGADO DE PÉPTIDO IB-M1 EN NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS DE ÓXIDO DE HIERRO (IONP@ IBM1) SOBRE EL PERFIL PROTEICO DE *ESCHERICHIA COLI* O157:H7

Gloria S. Ramírez a*, Johanna M. Flórez Castillo b, Wilfredo Valdivieso Quintero a, Jose Luis Ropero Vega a.

^a Grupo de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas para la sostenibilidad - CIBAS,

Universidad de Santander, Colombia.

^b Grupo de investigación en manejo clínico — CliniUDES, Universidad de Santander, Colombia * Autor de correspondencia: gramirez06@outlook.com

Palabras Claves: IONP@IbM1; Escherichia coli O157:H7; perfil proteico.

Escherichia coli O157:H7 es una bacteria patógena que ocasiona Enfermedades Transmitidas por Alimentos (ETAS); estas enfermedades se convierten en un problema de salud pública ya que se han encontrado cepas resistentes a diferentes antibióticos. Los péptidos Ib-M1 y su bioconjugado en nanopartículas magnéticas de óxido de hierro (IONP@IbM1) han surgido como una nueva alternativa de antimicrobianos ya que estos presentan actividad inhibitoria y bactericida contra E. coli O157:H7 y aislados clínicos. Además, su inmovilización no afecta su actividad antimicrobiana. Se han identificado que las dianas intracelulares de muchos de péptidos antimicrobianos influyen en más de una proteína diana dentro de la célula, lo que sugiere los múltiples modos de acción, sin embargo, el mecanismo de acción de IONP@IbM1 contra E. coli O157:H7 sigue siendo aún desconocido. Un primer paso para la determinación de este mecanismo de acción, es la identificación del cambio en el perfil de proteínas en presencia de estos nuevos compuestos antimicrobianos. Este trabajo cubre el análisis proteómico de E. coli O157:H7 para evaluar el efecto inhibitorio de IONP@IbM1 por medio de electroforesis bidimensional; la obtención de proteínas intracelulares se realizó utilizando el kit de extración ReadyPrep TM Protein (Total protein) (Bio-Rad). La separación de proteínas se realizó de acuerdo a sus puntos isoeléctricos mediante isoelectroenfoque (IEF), según ReadyPrep TM 2D Starter Kit (Bio-Rad) utilizando tiras IPG de pH 4-7; posterior a esto se realizó una electroforesis en gel de poliacrilamida SDS vertical con concentraciones finales de 12 y 5% (peso/volumen) en un sistema de electroforesis Protean II XI Cell (Bio-rad). La determinación de la variabilidad de los perfiles proteicos se realizó mediante PhotocaptMW (Vilber Loumat) y una vez obtenidos los perfiles proteicos se llevó a cabo un análisis de varianza (ANOVA). Los resultados muestran la identificación de proteínas expresadas diferencialmente y las cuales se encuentra involucradas en procesos de transporte, síntesis de proteínas, y reconocimiento de manera preferencial las proteínas involucradas en la síntesis de ácidos nucleicos.

ENCAPSULAMIENTO DE CURCUMINA EN NIOSOMAS MODIFICADOS CON B- CICLODEXRINAS, PARA EVALUACIÓN DE ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE

Leidy Stefanía Vargas Vélez a, Cristian C. Villa a*, Edwin Stiven Quiguanas Guarin b.

^a Programa de Química. Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías, Universidad del Quindío, Cra ¹⁵ Calle ¹² N. Armenia. Quindío.

^b Centro de Investigaciones Biomédicas (CIBM) - Universidad del Quindío, Cra ¹⁵ Calle ¹² N. Armenia. Quindío. * Autor de correspondencia: ccvilla@uniquindio.edu.co

Palabras Claves: Niosomas; β- ciclodextrina; Curcumina.

La curcumina es un componente bioactivo presente en la naturaleza con muchas propiedades anfiinflamatorias, antioxidantes e incluso anticancerígenas que se han estudiado recientemente. Sin embargo, es necesario que sea tratada dentro de sistemas organizados que le permitan optimizar sus cualidades. Este inconveniente se debe a que la curcumina no es soluble en agua y tiene una baja biodisponibilidad para los sistemas biológicos. De esta forma, los niosomas, son vesículas microscópicas que forman estructuras de bicapa cerrada por ser anfifilicas, estos compuestos usan para su formulación surfactantes no iónicos con el fin de mejorar la solubilidad en agua del componente que albergan en su interior, además de presentar ventajas de baja toxicidad, procedencia de fuentes renovables y afinidad con los sistemas biológicos. Al realizar una modificación de estos sistemas para incluir la β- ciclodextrina, se usa va que estos macro ciclos son una estrategia adicional para mejorar la cantidad cargada, la estabilidad y la biodisponibilidad de los componentes activos muy hidrófobos. En este trabajo se buscó la formulación de complejos de niosomas con curcumina y niosomas modificados con β- ciclodextrinas y curcumina, para su caracterización, la capacidad de encapsulamiento y estabilidad con el tiempo. Las formulaciones con niosomas se prepararon por mezclas equimolares de tween 80 y span 80, por el método de hidratación por película delgada, usando cloroformo y rota vaporando para formación de la película posteriormente se hidrato, se agito y se dejó estabilizar durante 72, posteriormente se realizó una homogenización del complejo, pasándolo en repetidas ocasiones por filtros. Para la modificación con la β- ciclodextrina, estos complejos primero fueron preparados por técnica de evaporación de solvente, en una mezcla de β- ciclodextraina en agua y curcumina en acetona, buscando concentraciones al 10% y al 30% de curcumina. Posteriormente esta solución fue liofilizada e incluida en el paso de hidratación de los niosomas. Los resultados de estas formulaciones fueron caracterizados por DSC, FTIR, Rayos X, se hizo un seguimiento por UV VIS, se realizó la actividad antioxidante, y la actividad antimicrobiana frente a candida albicans.



CRECIMIENTO DE NANOFIBRAS DE PVAL-OH UTILIZANDO LA TÉCNICA DE ELECTROHILADO, ENCAPSULAMIENTO DE IBUPROFENO Y SU CINÉTICA DE LIBERACIÓN EN UN MEDIO LÍQUIDO

Andriws D. Montoya a, Claudia P. Bravo a*, José H. Castillo a.

^a Grupo de Física de Materiales Inorgánicos y Orgánicos, Universidad del Quindío, Colombia
*Autor de correspondencia: cpbravo@uniquindio.edu.co

Palabras Claves: Ibuprofeno; nanotecnología; nanofibras; cinética de liberación.

En el campo de la medicina, la aplicación de fibras poliméricas en escala nanométrica surge a partir de la necesidad de retener fármacos y crear nuevos métodos para su liberación. En este trabajo se reporta el uso de la técnica de electrohilado para la preparación de nanofibras de poli vinil alcohol hidrolizado (PVAL-OH) con el propósito de encapsular ibuprofeno, y su posterior estudio de su cinética de liberación en un medio líquido. Se parte de la disolución de 1 gramo de PVAL-OH con peso molecular 145.000 de la casa comercial MERCK, en 20 ml de agua milli-Q, el proceso se realiza en un agitador magnético manteniendo una temperatura de 150 °C durante 60 minutos, una vez disuelto el polímero la solución se lleva a temperatura ambiente donde se deja agitando durante 12 horas. La solución polimérica y el ibuprofeno se inyectan controladamente por separado mediante un sistema de aguja coaxial, en una recámara cerrada que se mantiene a temperatura de 32 ± 0.1 °C y una presión de 300 ± 0.1 Pa, dejando además constante los siguientes parámetros experimentales: un potencial de 25 kV entre aguja-colector, una humedad relativa del 22 %, velocidad de inyección de 4 μL/h, y un tiempo de crecimiento de 1 hora y 30 minutos hasta obtener un parche aproximadamente de 1 mm de espesor. Se deja como variable la distancia aguja-colector entre 9 y 15 cm, para analizar la morfología que presentan las fibras sin y con fármaco retenido. La morfología y diámetro de las fibras sin y con ibuprofeno retenido se realiza mediante microscopía electrónica de barrido. Para los dos casos se encuentra fibras distribuidas de forma aleatoria con presencia de algunos defectos en forma de perlas. Las fibras sin fármaco presentan distribución de diámetro entre 50 y 130 nm, con diámetro medio de 90 nm, mientras las fibras que retienen el fármaco presentan diámetro promedio de 140 nm. La técnica de espectroscopia UV-vis permite identificar picos de absorción del ibuprofeno retenido en las nanofibras, en longitudes de onda entre 270 y 350 nm, permitiendo construir una curva de cinética de liberación.

NANOPARTÍCULAS DE ÓXIDO DE HIERRO COMO BIOMARCADORES PARA LA EVALUACIÓN DE LESIONES INTRACRANEALES

Yehidi J. Medina-Castillo a, Camila A. Lota-Mendoza a, Mónica Losada-Barragán b, Karina Vargas-Sánchez a, Daniel Llamosa-Pérez c, Rolando J. Rincón-Ortiz c*.

^a GRINCIBIO, Universidad Antonio Nariño, Bogotá D. C., Colombía

^b Biología celular y funcional e Ingeniería de biomoléculas, Universidad Antonio Nariño, Bogotá D. C., Colombía ^c GIFAM, Universidad Antonio Nariño, Bogotá D. C., Colombía

* Autor de correspondencia: rolrincon@uan.edu.co

Palabras Claves: Nanopartículas; magnetismo; óxido de hierro; bionanomarcador.

La nanotecnología aplicada en salud constituye uno de los mayores avances de los últimos años. Dentro de los nanomateriales con aplicaciones biomédicas las Nanopartículas Magnéticas (MNPs) presentan un alto interés, en especial como sondas de alta tecnología, que ampliarían la comprensión de enfermedades y reducirían los tiempos de diagnóstico empleando métodos no invasivos. Las MNPs son materiales ferro y ferrimagnéticos que exhiben un comportamiento característico, en que los spines atómicos se orientan en la misma dirección dentro de una región del material denominada dominio. Al reducir el material hasta tamaño nanométrico (menor que un dominio) se observa el superparamagnetismo. Las nanopartículas superparamagnéticas tienen unas propiedades diferentes a las del mismo material a escala macroscópica, exhibiendo características deseables en aplicaciones biomédicas. Estos nuevos bionanomarcadores magnéticos se encuentran generalmente formados por un núcleo metálico, un recubrimiento orgánico o inorgánico y una funcionalización variable, que dependerá de la aplicación de la nanopartícula.

En este trabajo se desarrolló un material nanoparticulado de óxido de hierro modificado superficialmente con óxido de silicio. Adicionalmente se exploró su potencial de aplicación como biomarcador. Las MNPs de óxido de hierro recubiertas con silicio fueron sintetizadas por métodos de química fina asistida por ultrasonidos, se realizaron caracterizaciones morfológicas, de microestructura y magnéticas, empleando difracción de Rayos X (DRX), microscopía electrónica de barrido (MEB), microscopía de fuerza atómica (MFA) y magnetómetro de muestra vibrante (VSM), con las que se validaron las características físicas requeridas. Para evaluar la aplicación de las MNPs, se acopló la MNP a un péptido marcador de neuroinflamación previamente identificado. La unión MNP-péptido biotinilado fue verificada mediante un revelado enzimático biotina-estreptavidina y un sustrato cromógeno TMB. Posteriormente, se realizaron pruebas in vitro en una línea celular para garantizar su biocompatibilidad y potenciales efectos en la viabilidad celular. Los resultados obtenidos tienen como perspectiva su evaluación in vivo en un modelo murino de neuroinflamación y evaluación diagnostica por resonancia magnética.



DESARROLLO DE UNA VACUNA LIPOSOMAL MOLECULARMENTE DEFINIDA CONTRA LA LEISHMANIASIS CUTÁNEA: FORMULACIÓN, CARACTERIZACIÓN Y PRUEBA DE EFICACIA PRECLÍNICA

<u>David E. Bautista-Erazo</u> ^a, Natalia García-Valencia ^a, Verónica Guzmán-González ^a, Gisela M. García-Montoya ^b, Juan F. Alzate-Restrepo ^b, José R. Ramírez-Pineda ^{a*}.

^a Grupo Inmunomodulación, Facultad de Medicina, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia
 ^b Centro Nacional de Secuenciación Genómica, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia
 * Autor de correspondencia: ramirezpineda@yahoo.com

Palabras Claves: Liposoma; nanovacuna; tripanotión reductasa; CpG; leishmaniasis.

La leishmaniasis cutánea (LC) es una enfermedad tropical parasitaria desatendida que representa un grave problema de salud pública en Colombia y el mundo. Dado que las herramientas profilácticas y terapéuticas disponibles para su manejo son deficientes, se requiere implementar nuevas alternativas. La vacunación representa la estrategia más costo-efectiva para la prevención de enfermedades infecciosas. Estudios previos de nuestro grupo en un modelo murino ulcerativo de LC por Leishmania panamensis (Lp) han demostrado que el CpG funciona como adyuvante protector cuando se combina con el lisado total del parásito, y que una formulación liposomal de este antígeno también es protectora. Adicionalmente, la proteína tripanotión reductasa (TR) fue identificada como una candidata promisoria a vacuna, y su administración en forma soluble protegió parcialmente a ratones del reto infeccioso con Lp. Considerando estos antecedentes, nosotros hipotetizamos que la administración profiláctica de TR usando un sistema de liberación particulado permitiría incrementar su eficacia. Para esto, se estandarizó la preparación de liposomas de TR y CpG modificando diferentes factores que intervienen en su preparación, respecto a diversas variables de respuesta como el tamaño, la carga y la eficiencia de encapsulación. Los liposomas optimizados fueron físicamente estables, catiónicos, micro/nanométricos, con una eficiencia de encapsulación de ~70% para CpG v ~20% para rTR. Posteriormente, estos liposomas se probaron en experimentos de vacunación en nuestro modelo murino de LC, evaluando la eficacia profiláctica por medio del seguimiento clínico y la medición de la carga parasitaria. En dos experimentos independientes, se observó que la vacunación con liposomas de rTR más CpG soluble protegió el 80% de los ratones contra el reto infeccioso tanto clínica como parasitológicamente, mientras que la rTR soluble no ejerció protección. Asimismo, los ratones vacunados sólo con liposomas de rTR tuvieron un índice de protección alto (63%), con una protección clínica y parasitológica evidente. En conclusión, la formulación liposomal del antígeno proteico mejora su eficacia protectora, denotando un efecto adyuvante intrínseco del vehículo, y el CpG potencia el poder protector del antígeno liposomal.

ENCAPSULAMIENTO DE GLIBENCLAMIDA EN NANOFIBRAS DE PVAL-OH, OBTENIDAS MEDIANTE LA TÉCNICA DE **ELECTROSPINING**

Jorge L. Daza a*, Oscar I. reyes a, José H. Castillo a.

a Grupo de Física de Materiales Inorgánicos y Orgánicos, Universidad del Quindío, Colombia *Autor de correspondencia: <u>ildazac@uqvirtual.edu.co</u>

Palabras Claves: Nanotecnología; nanofibras; glibenclamida; encapsulamiento.

Se reporta el crecimiento de nanofibras obtenidas a partir de la disolución de 1 gramo de PVAL-OH con peso molecular 145.000 de la casa comercial MERCK, en 20 ml de agua milli-Q, el cual se disuelve mediante agitación magnética a una temperatura de 423 K durante 30 minutos, se homogeniza la solución a temperatura ambiente durante 12 horas adicionales de agitación. Tanto la glibenclamida líquida y la solución polimérica obtenida se inyectan por separado mediante un sistema de aguja coaxial, en una recámara cerrada que se mantiene bajo condiciones de equilibrio térmico y mecánico, se aplica una diferencia de potencial de 20 kV entre aguja-colector, una humedad relativa del 30%, velocidad de invección de 4 μL/h, y un tiempo de crecimiento de 1 hora hasta obtener un parche aproximadamente de 1 ml de espesor. Las imágenes obtenidas mediante microscopia electrónica de barrido, muestran fibras con diámetro promedio de 90 nm para el sistema polimérico sin fármaco, mientras que para las fibras que retienen la glibenclamida se encuentra fibras con distribución de diámetro homogéneo de 120 nm. Para los dos sistemas se observa una disminución del área superficial debido a la formación de defectos en forma de perlas. Las medidas eléctricas realizadas a temperaturas por debajo del ambiente mediante espectroscopia eléctrica compleja y analizadas con el formalismo de la parte real de la conductividad eléctrica como función de la temperatura, para el sistema PVAL-OH/ glibenclamida y de glibenclamida en presentación líquida, permiten observar para el sistema polímero/fármaco encapsulado dos procesos de relajación por separado alrededor de 250 y 150 K, asociados respectivamente a movimientos a gran escala de la cadena principal del polímero y de la estructura química del fármaco. El proceso de relajación observado alrededor de 150 K, ocurre a temperaturas inferiores con respecto al observado para la glibenclamida en presentación líquida, lo cual permite evidenciar que el fármaco se encuentra encapsulado en la matriz formada por las nanofibras del polímero.



DISEÑO Y SÍNTESIS DE UN MARCADOR FLUORESCENTE BASADO EN NANOCLUSTERS DE ORO (AUNC) CON APLICACIONES EN BIOIMÁGENES DE *STAPHYLOCOCCUS AUREUS* RESISTENTE A METICILINA (SARM)

Ingrid J. Rincón Valdivieso ^a, Yuly A. Prada Vargas ^{a*}, Marlon Cáceres ^b, Rafael Cabanzo ^a, Enrique Mejía-Ospino ^a.

^a Laboratorio de Espectroscopia Atómica y Molecular (LEAM), Centro de Materiales y Nanociencias (CNM). Parque

Tecnológico Guatiguará. Universidad Industrial de Santander, Colombia.

^b Grupo de Investigación en Bioquímica y Microbiología (GIBIM). Escuela de Microbiología. Universidad Industrial de Santander, Colombia.

* Autor de correspondencia: yuly.prada@correo.uis.edu.co

Palabras Claves: Bioimágenes; fotolumiscencia; nanoclusters de oro; péptidos; SARM.

Los AuNC son sistemas nanoestructurados ultrafinos que se caracterizan por exhibir fotoluminiscencia en el rango visible, son fotoestables y presentan baja toxicidad. Pese a la dificultad para su obtención, una vez sintetizados pueden ser fácilmente funcionalizados con ligandos como péptidos, proteínas y otras moléculas activas, lo cual les otorga selectividad y especificidad por un target. Recientes estudios han mostrado su versatilidad marcadores fluorescentes con aplicaciones en bioimágenes de agentes patógenos como células cancerígenas, hongos y bacterias como SARM. Tanto la detección como la identificación de SARM son muy importantes ya que se considera un patógeno altamente virulento. SARM representa una amenaza para la salud pública que puede causar infecciones comunitarias y nosocomiales caracterizadas por lesiones en la piel, shock tóxico y sepsis.

Los AuNC fueron preparados usando HAuCl₄ (10 mM) como precursor metálico y BSA (50 mg/mL) como agente reductor. La presencia de grupos reductores como anillos aromáticos y residuos de tirosina y cisteína permitieron la estabulación a través de enlaces Au-S. El proceso de funcionalización se llevó a cabo a través del entrecruzamiento de AuNCs y un péptido sintético (NBC2254) activo frente a SARM usando [3- (2-piriditiol)-propionato)]-N-succinimida (SPDP) como agente entrecruzante. Finalmente, el sistema nanoestructurado AuNC@2254 registró un valor de 4,59 mV en el potencial zeta lo cual evidencia la modificación eficiente sobre la superficie de los AuNC inicialmente negativa (-39.4 mV). Dicha carga positiva mejora la interacción de los AuNC@NBC2254 con la membrana del patógeno en estudio. Los AuNC@NBC2254 con tamaño hidrodinámico de 6.15 nm exhibieron fluorescencia con un máximo de emisión a 631 nm (λ_{excitación} 380 nm) y rendimiento cuántico de 9.0%. Finalmente, fueron evaluados como marcador fluorescente en la obtención de imágenes de SARM empleando Microscopía de Fluorescencia.

IX SIMPOSIO DE QUÍMICA APLICADA (IX SIQUIA) Y I CONGRESO INTERNACIONAL DE NANOQUÍMICA, NANOFÍSICA Y NANOMEDICINA (I CINNN)

MEMBRANAS CONSTRUIDAS A PARTIR DE PVA MODIFICADO IÓNICAMENTE CON MGCL, PARA POSIBLE APLICACIÓN EN TEJIDO DE PIEL

Luisa F. Calderón ^a, V. H. Zapata ^{a*}, Melisa Buendía ^a.

^a Escuela de Física, Universidad Nacional de Colombia, Grupo de Óxidos Avanzados, A.A. ⁵⁶⁸, Medellín, Colombia * Autor de correspondencia: vhzapatas@unal.edu.co

Palabras Claves: Cloruro de magnesio; polialcohol de vinilo (PVOH); espectroscopia de impedancia.

Se ha estudiado el comportamiento termoeléctrico de un sistema compuesto polímero – sal (Polivinil Alcohol -PVOH + MgCl₂) con diferentes concentraciones sal/polímero: 0.7, 0.10, 0.15, conservando las mismas concentraciones de PVA y de disolvente. De las soluciones fueron obtenidos membranas utilizando el método de evaporación lenta del disolvente y fueron sometidas a estudios de caracterización eléctrica por medio de la técnica de espectroscopia de impedancia compleja con barridos de frecuencia entre 42 Hz y 1M Hz con una variación de la tempera entre los 25°C hasta 180°C. Desde el punto de vista eléctrico usando modelos actuales como la teoría de acoplamiento del Dr. K. L. Ngai pudimos establecer la energía efectiva o aparente Ea* que gobierna el comportamiento en la parte derecha del pico en la representación del módulo eléctrico con frecuencia (M" vs. v); dicha energía se encontraría correlacionada con la energía microscópica Ea del ion Mg⁺² por el salto o difusión en las cadenas poliméricas, en este caso la energía de activación es del orden 0,312 eV*K⁻¹ lo que indica potencialmente aplicable a la recuperación del tejido de piel.



PREPARACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE ÓXIDOS DE HIERRO PARA LA INMOVILIZACIÓN DEL PÉPTIDO ANTIMICROBIANO IB-M2 Y EVALUACIÓN DE SU ACTIVIDAD CONTRA *E. COLI* 0157:H7

Nathalia Ardila a*, Herminsul Cano a, Jose L. RoperoVega b, Indira P. Hernández b. Johanna M. Flórez-Castillo b.

^a Grupo de Investigación en Fisicoquímica Teórica y Experimental, Universidad Industrial de Santander, Colombia.
 ^b Universidad de Santander. Facultad de Ciencias Exactas, Naturales y Agropecuarias. Ciencias Básicas y Aplicadas para la Sostenibilidad – CIBAS. Bucaramanga, Santander, Colombia.
 *Autor de correspondencia: nathaliardila.ro@gmail.com

Palabras Claves: Co-precipitación; bioconjugado; cinéticas de crecimiento; nanotransportadores.

Escherichia coli es una batería patógena Gram negativa perteneciente a la familia Enterobacteriacae a la que se le atribuyen muchas de las infecciones gastrointestinales alrededor del mundo, generando en algunos casos la muerte. De acuerdo con la organización mundial de la salud OMS, esta es una de las bacterias que más ha desarrollado mecanismos para generar resistencia a los antibióticos convencionales. Los péptidos antimicrobianos (AMPs) son llamados a ser una alternativa por su alto potencial farmacológico. Esto se debe a que los AMPs tienen en su mayoría una estructura semejante a los metabolitos secundarios producidos por algunos seres vivos como mecanismo de defensa contra microorganismos. Sin embargo, estos compuestos son susceptibles a la degradación por proteasas y liberación de proteínas inhibidoras por parte del patógeno. Considerando lo anterior, el uso de nanopartículas como las de óxido de hierro (IONPs) se convierten en una alternativa para la inmovilización de AMPs y su posterior transporte en sistemas de interés biológico.

En este trabajo se reporta la preparación de nanopartículas de óxidos de hierro mediante el método de co-precipitación y su uso como soporte para la inmovilización del péptido antimicrobiano IbM2. Las propiedades estructurales de las nanopartículas y del bioconjugado obtenido (IbM2/IONPs) fueron caracterizadas mediante dispersión de luz dinámica (DLS), espectroscopía infrarroja (FT-IR), difracción de Rayos X (XRD), microscopía de electrónica de barrido (SEM) y espectroscopia fotoelectrónica de rayos X (XPS). La actividad antimicrobiana del bioconjugado obtenido fue evaluada contra una cepa de *E. coli* O157:H7 mediante cinéticas de crecimiento durante 24 h. Las principales fases cristalinas obtenidas para las IONPs fueron la magnetita y la maghemita con tamaños de partícula entre 10 y 15 nm. Se obtuvo un porcentaje de inmovilización del péptido de 57% con el método utilizado. La concentración mínima inhibitoria del IbM2 libre fue 6.25 mM y su actividad se mantiene cuando es inmovilizado sobre IONPs. Estos resultados representan un avance en estudios de sistemas para el transporte de biomoléculas con potencial actividad antimicrobiana.

ESTUDIO DE LA AFINIDAD DE UN PÉPTIDO-LIGANDO A SUS POSIBLES RECEPTORES, COMO BIOMARCADOR PARA LA EVALUACIÓN SE ALTERACIONES MOLECULARES DE LA BARRERA HEMATOENCEFÁLICA

Yehidy J. Medina^a, Mónica Losada-Barragán^b, María Mogilevskaya^c, Karina Vargas-Sánchez^{a*}.

^a GRINCIBIO, Universidad Antonio Nariño, Bogotá D. C., Colombía

^b Biología celular y funcional e Ingeniería de biomoléculas, Universidad Antonio Nariño, Bogotá D. C., Colombía ^c Universidad ECCI, Bogotá D. C., Colombía

* Autor de correspondencia: jeinny.vargas@uan.edu.co

Palabras Claves: Barrera hematoencefálica (BHE); péptidos; biomarcadores; flotilina; laminina; neuroinflamación.

El desarrollo de procesos neuronflamatorios pueden ser desencadenados por cambios en las células glía o alteraciones en la permeabilidad de la barrera hematoencefalica. Estas alteraciones, pueden ser representadas por cambios en la expresión de receptores de membrana, proteínas de la lamina basal, proteínas de adhesión, entre otros factores que activan o facilitan una la infiltración de células del sistema inmune hacia el parénquima cerebral.

En este contexto, ha sido de especial interés desarrollar y validar ligandos peptídicos los cuales puedan servir como bio-marcadores de receptores específicos, diferencialmente identificados o caracterizados desde las regiones sanas del cerebro o sin aparente lesión (material blanca normal), pero también aquellos altamente representativos de poblaciones celulares especificas bajo condiciones neuro-inflamatorias y que pudieran ser herramientas útiles en el diagnóstico de procesos neuroinflamatorios en humanos. Teniendo en cuenta esto, en la presente propuesta de investigación se busca validar el patrón de interacción de un péptido biomarcador a varios posibles receptores celulares. Este péptido fue previamente identificado y seleccionado bajo condiciones neuroinflamatorias, por su alta especificidad en el marcaje de la barrera hematoencefalica.

Con el péptido seleccionado, el cual en adelante será mencionado como péptido 88, se realizaron ensayos de afinidad a sus posibles receptores celulares entre los cuales se han seleccionado, galectina-1, caveolina-1, laminina beta-1, flotilina-1, fibronectina y anexina-2. Estas proteínas fueron seleccionadas desde un análisis proteómico por espectrometría de masas, teniendo en cuenta su localizacion subcelular, como proteinas de membrana, lamina basal o adhesion celular y ubicación en las uniones estrechas del endotelio vascular y son evaludas como candidatos a biomarcadores específicos de las alteraciones en la BHE bajo condiciones de neuroinflamación. Los ensayos de afinidad peptido-receptor, fueron desarrollados mediante ELISA, en donde se estableció la concentración a la cual el péptido interactúa con estas proteínas. Como resultado la proteína laminina beta-1 y flotilina mostraron afinidad de interacción con el péptido 88, a diferencia de las demás proteínas evaluadas donde no se evidenció la interacción con el péptido.



BIOSÍNTESIS DE NANOPARTÍCULAS DE HIERRO A PARTIR DE DRENAJES ÁCIDOS DE MINA DE CARBÓN

Natalia A. Mariño a, Julia C. Reyes a, Luz. M. Lizarazo b*.

^a Grupo de Investigación Química Ambiental, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Colombia.

Palabras Claves: Drenaje ácidos de minas; actividad minera; *Bacillus subtilis*; nanopartículas de magnetita.

La actividad minera, puede generar diversos impactos ambientales que ponen en riesgo la calidad y disponibilidad de los recursos hídricos, ocasionando alteraciones en el ecosistema. Situación que se vive actualmente en el municipio de Socha-Boyacá en donde se ha venido generado una transformación en el entorno para dar paso a la actividad minera, originando un problema de contaminación de los recursos hídricos por los drenajes ácidos de mina (DAM). Uno de los principales minerales es la pirita (FeS₂) que al entrar en contacto con el aire y el agua u otros compuestos de hierro da lugar a sales de hierro y ácido sulfúrico, que junto a la alta acidez del agua favorece la dilución de algunos metales pesados y moléculas orgánicas contaminantes. El contenido de hierro de estos drenaje ácidos de mina de carbón de Socha, es muy superior al 5ppm, que es lo establecido en la resolución 0631 de 2015.

Se utilizó tanto el sobrenadante como la biomasa del cultivo bacteriano de una cepa de referencia de *Bacillus subtilis*, para la síntesis de las nanopartículas, además se estudió el efecto del tiempo de incubación, el pH y la temperatura en la formación de las nanopartículas. La caracterización de las nanopartículas sintetizadas se realizó utilizando un espectrofotómetro UV-Visible, difracción de rayos X y Microscopia Electrónica de trasmisión (TEM). Las nanopartículas obtenidas por la biosíntesis están compuestas por magnetita (Fe_3O_4), y puede remover plomo y cadmio de medios acuosos sin ningún tratamiento de recubrimiento previo. Se plantea el uso de estas nanopartículas, para la descontaminación del recurso hídrico, principalmente de aguas residuales de origen industrial contaminadas con metales pesados.

b Grupo de Investigación Biología Ambiental, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Colombia.

* Autor de correspondencia: bio.ambient@uptc.edu.co

PHOTOSENSITIVE NANOBIOCONJUGATES FOR SPECIFIC DELIVERY OF DOFETILIDE INTO CARDIAC CELLS

Pedro A. Mena-Giraldo a, Sandra M. Pérez-Buitrago b, Maritza Londoño c, Isabel C. Ortiz c, Lina M. Hoyos c,

^a Max Planck Tandem Group in Nanobioengineering, Universidad de Antioquia, Colombia. ^b Especialidad Ingeniería Biomédica, Pontificia Universidad Católica del Perú, Peru. ^c Grupo de Investigación Biología de Sistemas, Universidad Pontificia Bolivariana, Colombia. * Corresponding Author: grupotandem.nanobioe@udea.edu.co

Keywords: Nanobioconjugate; photosensitive nanocarriers; nanomedicine; cardiac cells.

Photosensitive nanocarriers (PNcs) offer excellent space-temporal control in drug delivery. This is explained because the PNcs are based on polymers conformed by photoactive groups that may experience structural, conformational and sterochemical changes such as photoisomerization and photocleavage after exposition to ultraviolet light (UV) and near infrared irradiation. Atrial fibrillation (AF) is the most common sustained arrhythmia. Its available treatment is based on the use of the dofetilide antiarrhythmic, which is ineffective and hampered by significant side effects. This work reports on the development of a functional photoresponsive polymeric nanocarriers for intracellular dofetilide delivery in cardiomyocytes. The new UV-photosensitive PNcs were readily synthetized by modification of the biopolymer chitosan with a UV-photosensitive molecule. The PNcs were further functionalized with a transmembrane peptide bioreceptor to achieve the cardiomyocytes site-specific dofetilide delivery. The resultant nanobioconjugate (NBc) at 0.15 mg/ml demonstrated to encapsulate 14.57 dofetilide and photorelease 83.25 % of it, after 14 seconds of UV irradiation, without presenting cellular phototoxicity at the tested time. Fluorescence microscopy experiments showed that the NBc had affinity for the cardiomyocytes, demonstrated by a higher internalization extent, with respect to the concomitant PNcs counterparts. The NBc occupied an average of 18.90 % of the cells area, after 8 h of incubation. Such NBc concentration resulted to be biocompatible as demonstrated by MTT viability experiments. The overall results demonstrated that delivering dofetilide in a controlled temporal-space fashion by functional NBc may be a strategy to improve the effectiveness of the AF treatment, by incrementing its intracellular concentration into cardiac cells that may decrease its side effects.



AGENTES ANTIMICROBIANOS MULTIDIRECCIONALES NANOESTRUCTURADOS BASADOS EN AGº: SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y MODULACIÓN DE SUS PROPIEDADES HEMOLÍTICAS

Yuliana Sánchez^a, Tulio A. Lerma a,b, María C. Bolaños c, Manuel Palencia a*.

^a Grupo de Investigación en Ciencias con Aplicaciones Tecnológicas (GI-CAT), Universidad del Valle, Cali - Colombia

^b Mindtech Research Group (Mindtech-RG), Mindtech s.a.s., Barranquilla-Colombia

^c Mindtech Research Group (Mindtech-RG), Mindtech s.a.s., Montería-Colombia

*Autor de correspondencia: manuel.palencia@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Hemólisis; reducción química; N-metil-D-glucamina; agente antibacteriano.

La resistencia a los antimicrobianos es una problemática de gran interés en salud pública ya que se relaciona con la inefectividad de algunos tratamientos y la proliferación de infecciones nosocomiales. Por lo tanto, el desarrollo de alternativas antibacterianas que eliminen el riesgo de la generación de resistencia es una meta de mucha relevancia desde el punto de vista farmacológico, adquiriendo particular importancia en afecciones de la salud que impliquen heridas e infecciones múltiples, como es el caso de la leishmaniasis cutánea. Actualmente, las nanopartículas de plata (AgNPs) son ampliamente reconocidas por su potencial terapéutico en el tratamiento de infecciones por microorganismos, entre las que se incluyen infecciones bacterianas e incluso por protozoos del género Leishmania. Dentro de las ventajas de as AgNPs está su fácil preparación, relativamente bajo costo, menor toxicidad que los tratamientos basados en antimonio (V), en el caso de la leishmaniasis, y su multidireccionalidad de acción que imposibilita la formación de resistencia. Sin embargo, la aplicación de las AgNPs se ve limitada por su fuerte actividad hemolítica, siendo un aspecto de gran importancia cuando las infecciones a tratar están asociadas a heridas. Debido a que las propiedades superficiales de las AgNPs pueden modularse por la naturaleza de su interfase, el objetivo de este trabajo fue estudiar el efecto de diferentes agentes de estabilización en la modulación de las propiedades antimicrobianas y hemolíticas de las AgNPs. Para ello, se sintetizaron AgNPs, por reducción química, con diferentes agentes estabilizantes: N-metil-D-glucamina, citrato de sodio y poli(vinilpirrolidona); en relaciones molares 1:1, 1:3, 1:6 y 1:10 [Ag: Agente estabilizante]. Las AgNPs se caracterizaron mediante espectroscopia ultravioleta-visible, dispersión dinámica de la luz y microscopia de trasmisión electrónica. Finalmente, se evaluó su actividad antimicrobiana frente a Escherichia coli y Staphylococcus aureus, mientras que su actividad hemolítica se evaluó mediante el método ASTM F756-13. Los resultados obtenidos evidencian la dependencia de las propiedades de las AgNPs con la naturaleza del agente estabilizante, además de permitir concluir que es posible la modulación de la actividad hemolítica sin pérdida de la actividad antimicrobiana de las AgNPs en función de la cantidad y naturaleza del estabilizante empleado.

SÍNTESIS DE NANOPARTÍCULAS DE PLATA Y SU ACTIVIDAD BACTERICIDA EN FUNCIÓN DEL TAMAÑO Y ESTADO DE **AGREGACIÓN**

Juan F. Ramírez Henao at, Juliana Ortiz Jiménez a, Carlos A. Naranjo Galvis b, Francy N. Jiménez García a,c, Oscar Moscoso Londoño a.

^a Departamento de Física y Matemáticas, Universidad Autónoma de Manizales, Colombia. ^b Departamento de Ciencias Básicas Biológicas, Universidad Autónoma de Manizales, Colombia. ^c Deapartamento de Física y Química, Universidad Nacional de Colombia, Colombia. *Autor de correspondencia: juan.ramirezhe@autonoma.edu.co

Palabras Claves: Nanopartículas de Plata; nanopartículas coloidales; efecto bactericida; propiedades fisicoquímicas.

El presente trabajo reporta la síntesis de diversos sistemas de nanopartículas (NPs) de plata en suspensión coloidal. En todos los casos se implementaron protocolos de síntesis química, usando como agente precursor el nitrato de plata (AgNO₂). Con el fin de promover cambios en el tamaño medio de las nanopartículas y en el estado de agregación de estas, se introdujeron cambios en el proceso de síntesis. Se usaron tres diferentes compuestos como agentes reductores (borohidruro de sodio, citrato de potasio con ácido ascórbico y etilenglicol con polivinilpirrolidona (PVP)), así mismo se varió la relación de concentración entre el AgNO, y el agente reductor y la temperatura de síntesis. Las estructuras de las NPs se evaluaron vía difracción de rayos X (analizando la aglomeración y decantación). Se comprobó que la estructura cristalina de las nanopartículas corresponde con la de la plata. Las propiedades ópticas se estudiaron mediante espectrofotometría Uv-Visible, de donde se determinó, indirectamente, el tamaño y la distribución de tamaños de las nanopartículas obtenidas. Adicionalmente, se practicaron pruebas de absorción atómica para determinar su concentración en la solución y relacionarla con la eficiencia del agente reductor. Finalmente, se analizó in vitro el efecto bactericida de las nanopartículas de plata en bacterias gram positivas y gram negativas en agar Mueller Hinton y en caldo enriquecido, donde se evidenció un efecto bacteriostático y bactericida.



POTENCIAL APLICACIÓN DE BIONANOCOMPÓSITO ELABORADO A PARTIR DE FIBRAS DE FIQUE Y NANOPARTÍCULAS METÁLICAS EN LA DEGRADACIÓN DE COLORANTES PROVENIENTES DE LA INDUSTRIA TEXTIL

Juan D. Sánchez-Moreno a, Eduart A. Gutiérrez-Pineda a*, Cristian Blanco-Tirado a, Marianny Y. Combariza a. ^a Escuela de Ouímica, Universidad Industrial de Santander, Colombia *Autor de correspondencia: eduaragp@gmail.com

Palabras Claves: Fique; celulosa; nanopartículas; bionanocompósitos; colorantes.

Los residuos generados de la industria textil se caracterizan por su alto contenido de colorantes, estos compuestos xenobióticos están diseñados para ser altamente resistentes al lavado y a la degradación microbiana, por lo que son difíciles de eliminar en plantas de tratamiento convencionales. Simultáneamente, la decoloración de aguas contaminadas usando métodos económicos y factibles a escala industrial ha sido tema de interés durante las últimas décadas. Con el paso de los años y los avances en la nanotecnología, las nanopartículas (NPs) se han presentado como una herramienta útil en múltiples aplicaciones científicas como medicina, microbiología y remediación química. Las NPs se muestran como un recurso valioso para conferir nuevas propiedades a las superficies de materiales ya existentes, dando formación a novedosos nanomateriales o nanocompósitos. De igual manera, se ha demostrado que las fibras celulósicas, han resultado ser un excelente soporte para deposición de NPs metálicas, generando bionanocompósitos con excepcionales propiedades catalíticas. En este trabajo, se realizó la modificación superficial de fibras celulósicas mediante la activación con N,N'-Carbonildiimidazol, se estableció una metodología que permite la formación de un enlace tipo carbamato bajo condiciones experimentales suaves y que funciona como compuesto intermediario para posteriores síntesis con funciones orgánicas altamente polares como aminas primarias o ácidos carboxílicos. La modificación química de las fibras de celulosa fue monitoreada mediante FTIR-ATR, XPS y SS-NMR. Posteriormente, se desarrolló una metodología para obtener un nuevo bionanocompósito por medio de la síntesis in situ de nanopartículas metálicas sobre la matriz de fibras de celulosa modificadas, la nucleación de las NPs ocurrió sobre funciones amino previamente ancladas sobre el biopolímero. Las nanopartículas metálicas sintetizadas fueron caracterizadas mediante SEM y XDR, estas funcionaron como centros catalíticos para la descomposición de colorantes presentes en muestras de agua desechadas por la industria textil.

ESPECTROSCOPÍA RAMAN INTENSIFICADA POR EFECTO DE SUPERFICIE DEL NANOCOMPOSITO DE ÓXIDO DE GRAFENO-NANOPARTÍCULAS DE PLATA PARA LA DETECCIÓN DE **VAPROTIDE**

Ivette E. Castiblanco a*, Iván D. Gomez a, Enrique Mejía a, Rafael. Cabanzo a.

^a Universidad Industrial de Santander, Laboratorio de Espectroscopia Atómica y Molecular (LEAM)
*Autor de correspondencia: ivette.castiblanco@correo.uis.edu.co

Palabras Claves: Óxido de Grafeno, nanopartículas de plata, péptidos, espectroscopia raman, SERS.

El desarrollo de nanocompositos de diagnóstico para la industria médica es de gran interés. Su estudio se fundamenta en la activación de ligandos biomoleculares, tales como los péptidos, que se encuentra en bajas concentraciones en el cuerpo humano, de este modo, SERS resulta ventajoso, pues mediante esta técnica para su análisis no se requiere preparación de muestras, se usa poca cantidad de la misma y las señales son muy estables, además, puede ser aplicado in vivo y con mucha rapidez. De otra parte, el uso de óxido de grafeno funcionalizado con nanopartículas de plata puede ser utilizado como sustrato en SERS de Vapreotide, como se demuestra en éste trabajo. Un análisis por espectroscopía UV-Vis del nanocomposito permitió confirmar las transiciones propias del óxido de grafeno y de las nanopartículas de plata, así mismo, mediante espectroscopia infrarroja (FTIR) se pudieron identificar los grupos funcionales propios de cada estructura constatando su funcionalización, usando difracción de rayos X se confirmaron las fases correspondientes al óxido de grafeno y se determina el número de capas en el mismo. Finalmente, mediante espectroscopia Raman se constató el efecto SERS. El composito permitió la intensificación de las señales del Vapreotide en un factor de 10⁹ confirmando el efecto SERS. El método utilizado en la síntesis de nanocomposito es verde, manteniendo un pH biológico, de modo que el nuevo nanocomposito pueda ser utilizado en la industria médica.



ESTABLECIMIENTO DE LAS CONDICIONES PARA LA OBTENCIÓN DE SISTEMAS NANOESTRUCTURADOS EMPLEANDO POLIETILENGLICOL-B-POLI(E-CAPROLACTONA) (PEG-B-PCL)

Angie L. Arévalo Rodríguez^a, León Darío Pérez Pérez^b, Yolima Baena Aristizábal^{a*}.

^a Departamento de Farmacia - Grupo de Investigación Sistemas para la Liberación Controlada de Moléculas Biológicamente Activas (SILICOMOBA), Universidad Nacional de Colombia, Colombia. ^b Departamento de Química – Grupo de Macromoléculas, Universidad Nacional de Colombia, Colombia.

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

Palabras Claves: Nanopartículas; mPEG-b-PCL; PVA; cafeína.

El presente trabajo de investigación buscó establecer algunas de las condiciones más adecuadas para el desarrollo de sistemas nanoestructurados con metoxipolietilenglicol-b-poli(\varepsilon-caprolactona) (mPEG-b-PCL), un copolímero que posee una alta biocompatibilidad y biodegradabilidad, sintetizado por el método de polimerización por ruptura del anillo de caprolactona (CL). Para la elaboración de las nanopartículas se utilizó la metodología de doble emulsificación con evaporación de solvente y se establecieron como condiciones iniciales: concentración de fármaco modelo hidrofílico a encapsular (cafeína) ≈ 20 mg/mL, volumen fase acuosa interna 2 mL, concentración de copolímero 1% p/v, volumen fase orgánica 10 mL, volumen fase acuosa externa ≈ 88 mL; emulsificación 1 a 11600 rpm por 4 min, emulsificación 2 a 13000 rpm por 4 min, evaporación de solvente orgánico durante ≈ 24 h con agitación magnética a 300 rpm. Se evaluó el uso de dos tipos de estabilizantes (PVA 2% v mPEG-b-PCL~10 kDa 0,01%, 0,05%, 0,1%). Se obtuvieron sistemas nanoestructurados con tamaños de partícula, índice de polidispersidad (PDI) y potencial Z adecuados para todos los casos (163 a 272 nm, 0,243 a 0,352 y -23 a -9 mV, respectivamente). Sin embargo, hubo una baja eficiencia de encapsulación, con un mejor desempeño del sistema estabilizado con PVA 2% (EE=34%), resultado que es necesario confirmar por un método de cuantificación directa. Finalmente, los resultados de influencia de la concentración del mPEG-b-PCL ~10 kDa no se consideran exactos debido a problemas de disolución del copolímero en agua, por lo que se debe replantear el método de disolución del estabilizante.

ESTABLECIMIENTO DE LAS CONDICIONES PARA LA OBTENCIÓN DE SISTEMAS NANOESTRUCTURADOS EMPLEANDO QUITOSANO, CON APLICACIÓN EN EL DESARROLLO DE SOLUCIONES IRRIGADORAS PARA ENDODONCIA

Leidy P. Duenas a, Yolima Baena a*.

^a SILICOMOBA, Universidad Nacional de Colombia, Colombia. * Autor de correspondencia: ybaenaa@unal.edu.co

Palabras Claves: Quitosano; nanopartículas, ácido benzóico, tripolifosfato pentasódico y endodon-

En el campo de la endodoncia es de interés el uso de nanopartículas (NPs) de quitosano, principalmente por sus propiedades antibacterianas, el uso concomitante de tripolifosfato pentasódico (TPP) y ácido benzoico puede generar remineralización y potenciar el efecto antimicrobiano, respectivamente. Pese a que existen otras sustancias irrigadoras, actualmente se busca reemplazarlas para ofrecer mayor seguridad. En el presente trabajo se busca establecer las condiciones de obtención de NPs de quitosano para encapsular ácido benzoico; se estudiaron variables de ensayo tales como cantidad de ácido necesario para la disolución del quitosano, tiempo de agitación para disolverlo de manera óptima, influencia del pH de la solución del polímero y temperatura de adición del TPP sobre variables respuesta como el tamaño de partícula y el índice de polidispersión (IPD). Establecidas estas condiciones se elaboraron NPs cargadas con ácido benzoico a las que se les caracterizaron tamaño de partícula, IPD, potencial zeta, eficiencia de encapsulación y rendimiento. Las interacciones del ácido benzoico y del TPP con el polímero, se verificaron mediante espectroscopia de absorción infrarroja por transformada de Fourier (IRTF) y calorimetría diferencial de barrido (DSC). La disolución del quitosano en ácido benzoico mostró un pH favorable para la reticulación del polímero y se vio favorecida por el calentamiento a 60° en baño maría y la adición de TPP a 4°C en un tiempo menor a 30 segundos. Estas condiciones evidenciaron las mejores características para la formación de NPs de quitosano con TPP. Las técnicas de IRTF y DSC permitieron determinar la interacción del ácido benzoico a la matriz polimérica. De esta manera, se establecieron las condiciones de obtención de las NPs caracterizadas por un tamaño de partícula de 251 nm, IDP de 0.25, potencial zeta de +38.5, rendimiento del 74,3%, y una eficiencia de encapsulación del 15,4 %. Propiedades adecuadas para ser aplicadas en el desarrollo de soluciones irrigadoras para endodoncia.



GENOSENSORES PARA EL DIAGNÓSTICO DE INFECCIONES VIRALES TRANSMITIDAS POR MOSOUITOS

<u>Daniel S. Alzate</u> ^a, Nestor S. Cajigas ^a, Sara M. Robledo ^b, Carlos E. Muskus ^b, Jahir. Orozco ^{a*}.

**a Max Planck Tandem Group in Nanobioengineering, Universidad de Antioquia, Colombia.

**b Programa de Estudio y Control de Enfermedades Tropicales – PECET, Universidad de Antioquia, Colombia.

**Autor de correspondencia: grupotandem.nanobioe@udea.edu.co

Palabras Claves: Genosensores; virus del zika; detección diferencial; electroquímica; bioinformática.

Colombia es un país altamente propenso a enfermedades infecciosas, entre las cuales la causada por el virus del zika se considera de gran relevancia clínica y epidemiológica. Las mujeres que están infectadas con el virus tienen un riesgo elevado de dar a luz niños con microcefalia, malformaciones congénitas y síndromes neurológicos agudos. En 2014, se generó una emergencia mundial por la infección, que evidenció la necesidad de herramientas diagnósticas rápidas y confiables. Los genosensores son dispositivos con potencial para enfrentar emergencias epidemiológicas, ya que responden de forma rápida, sensible y altamente selectiva a blancos moleculares. Su alta selectividad y versatilidad los convierten en plataformas de detección prometedoras en el campo diagnóstico. En este contexto, presentamos el desarrollo de un biosensor electroquímico diferencial para el diagnóstico del virus del zika y su discriminación frente a arbovirus homólogos como el dengue y el chikungunya. En el primer paso del desarrollo, se llevó a cabo un estudio bioinformático riguroso que permitió el diseño y la selección sistemática de las secuencias moleculares blanco, de captura y de señal. La metodología experimental implicó luego la detección electroquímica del blanco genético del virus en un formato de hibridación tipo sándwich entre la sonda de captura biotinilada y la sonda de señal marcada con digoxigenina. Esta última sonda fue reconocida por un anticuerpo anti-digoxigenina marcado con la enzima peroxidasa de rábano picante (HRP). La enzima en presencia de H₂O₂, oxida una molécula electroquímicamente activa que actúa como mediadora del proceso de transferencia de electrones y que se reduce de nuevo en la superficie del electrodo, mediante la aplicación del potencial adecuado a través de un potenciostato portátil.

Los nanogenosensores se probaron primero con cadenas de ADN sintéticas de zika, dengue y chikungunya en soluciones buffer y en muestras fisiológicas de suero, saliva y orina y finalmente se validaron con ARN de cultivos celulares infectados con el virus del zika.

Los resultados obtenidos demuestran que el biosensor desarrollado es una herramienta prometedora para el diagnóstico diferencial del virus del zika, más cercano al paciente y de especial impacto en áreas propensas al padecimiento de enfermedades infecciosas tropicales.

DESARROLLO DE UN RECUBRIMIENTO POLIMÉRICO NANOREFORZADO CON CAPACIDAD DE REPELER CARGAS ELÉCTRICAS NEGATIVAS Y SU APLICACIÓN EN EL TRATAMIENTO DE LA ENFERMEDAD ATEROSCLERÓTICA

Luz M. Rivera a*, Lina M. Hoyosa, Alejandra García b.

^a Grupo de dinámica de sistemas, Universidad Pontificia Bolivariana, Colombia ^b Centro de Investigación en Materiales Avanzados S.C., México * Autor de correspondencia: <u>luzmariariverarivera@hotmail.com</u>

Palabras Claves: Óxido de grafeno reducido; dopaje con nitrógeno; lipoproteínas de baja densidad; aterosclerosis.

En el trabajo se presenta un nuevo método de síntesis por exfoliación química de óxido de grafeno reducido, dopado térmicamente con nitrógeno y funcionalizado (N-rGO-f) para generar afinidad química hacia el polímero fosforilcolina, el cuál fue reforzado con el N-rGO-f y electrohilado obteniendo un recubrimiento apto para stents con la capacidad de repeler cargas eléctricas negativas como las presentes en las lipoproteínas de baja densidad, las cuales al entrar en contacto con las paredes arteriales desencadenan el proceso de formación de la placa de ateroma. El N-rGO y el recubrimiento final fueron caracterizados mediante SEM y TEM verificando la morfología y la existencia de la red hexagonal, RAMAN verificando el grado de defectos y dopaje con nitrógeno, DRX viendo las distancias interplanares, XPS con el cual se verifica un porcentaje de dopaje con nitrógeno del 9.57% y la generación de enlaces tipo piridínico, pirrol y cuaternario entre el carbono y el nitrógeno, AFM identificando tamaños de láminas en el orden de las micras y espesores de aproximadamente 2 nm que significan la presencia de 2 a 3 capas de grafeno apiladas, Kelvin Probe Force Microscopy (KPFM) y Angulo de contacto con los que se determina que el N-rGO y el material final si cumplen el propósito de repeler cargas eléctricas negativas gracias a su potencial de superficie negativo y finalmente se hacen pruebas de viabilidad en células endoteliales y monocitos de sangre periférica obteniendo respuestas favorables al contacto con el N-rGO. De esta manera se comprueba que el recubrimiento polimérico reforzado con N-rGO-f tiene la capacidad de repeler las lipoproteínas de baja densidad prometiendo de este modo ser útil como recubrimiento de stents en el tratamiento correctivo / preventivo de la enfermedad aterosclerótica.



ENCAPSULAMIENTO DE EXTRACTO DE *PASSIFLORA EDULIS* EN NANOFIBRAS DE PVAL-OH, UTILIZANDO LA TÉCNICA DE ELECTROHILADO, Y CINÉTICA DE LIBERACIÓN

Andrea C. Castillo a*, Patricia Landazuri b, José H. Castillo c.

^a Grupo de Física de Materiales Inorgánicos y Orgánicos, Universidad del Quindío, Colombia.

^b Grupo de Investigación de Enfermedades Cardiovasculares y Metabólicas, Universidad del Quindío, Colombia.

^c Grupo de Física de Materiales Inorgánicos y Orgánicos, Universidad del Quindío, Colombia.

*Autor de correspondencia: accastillob@uqvirtual.edu.co

Palabras Claves: Nanotecnología; encapsulamiento; fármacos; nanofibras; Passiflora edulis.

En este trabajo se reporta el uso de la técnica de electrohilado para la preparación de nanofibras de poli vinil alcohol hidrolizado (PVAL-OH) con el propósito de encapsular y retener extracto de Passiflora edulis para posteriores aplicaciones biomédicas en sistemas de liberación de fármacos. El crecimiento de las fibras parte de la disolución de 1 gramo de PVAL-OH con peso molecular 145.000 de la casa comercial MERCK, en 20 ml de agua milli-Q, el proceso se realiza en un agitador magnético manteniendo una temperatura de 130 °C durante 30 minutos, una vez disuelto el polímero la solución se lleva a temperatura ambiente donde se deja agitando durante 12 horas, después se mezcla por dos horas adicionales concentraciones en peso 50, 100 y 200 µL de extracto Passiflora edulis hasta obtener una solución polímero/fármaco homogénea. La recámara de crecimiento permite tener condiciones de equilibrio térmico y mecánico a una temperatura de 29.02 ± 0.1 °C y una presión de 300 ± 0.1 Pa, además se deja constante los siguientes parámetros experimentales: una distancia aguja-colector entre 12 y 15 cm, un potencial de 25 kV entre aguja-colector, una humedad relativa del 30% dentro de la recámara, velocidad de invección de 4 µL/h, y un tiempo de crecimiento de 1 hora y 30 minutos hasta obtener un parche aproximadamente de 1 ml de espesor. El análisis estadístico del diámetro de las fibras observados en las imágenes obtenidas por microscopia electrónica de barrido SEM, muestra una distribución entre 50 y 130 nm, con diámetro medio de 90 nm para las fibras sin fármaco, mientras que las fibras que retienen el fármaco presentan un diámetro promedio de 140 nm sin defectos superficiales aparentes. La cinética de liberación del fármaco realizada en un medio líquido, se estudia mediante espectroscopia UV-visible empleando un espectrómetro 115U. Se identifica el pico característico de absorción del extracto de Passiflora edulis sin encapsular y retenido en las nanofibras poliméricas en una longitud de onda entre 265 y 320 nm. Los resultados permiten evidenciar que el fármaco se encuentra solidificado en la matriz polimérica.





PROPOSAL OF A DEPENDENT TEMPERATURE POTENTIAL FOR MOLECULAR DYNAMICS IN THE PBF,

Jeison D. López a*, Hernando Correa b, Griselda García c, Jesús E. Diosa a. a Departamento de Física, Universidad del Valle, Colombia ^b Laboratorio de Optoelectrónica, Universidad del Quindío, Colombia ^b Departamento de Física Teórica, Pontificia Universidad Católica de Chile, Chile * Autor de correspondencia: jeison.lopez@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Lead fluoride; molecular dynamics; temperature-dependent interaction potential; ionics conductors.

In this work, an inter-ionic temperature-dependent potential in an ionic conductor as PbF2 is used to perform calculations by molecular dynamics, which allows to calculate with good precision properties such as linear thermal expansivity and the dependence of the lattice parameter with the temperature. This type of potential can be represented as a sum of a potential independent of temperature, with a dependent potential as a correction, justified by the one-dimensional quantum Newton equation. In this paper, two adjustment regions were used, one from 300 to 700 K and the other from 700 to 900 K that arise naturally due to the smooth and continuous transition that lead fluoride undergoes until it reaches the superionic state. This choice allows us to model with good precision the anomaly present in the dependence of the lattice parameter with the temperature of this material, which until now had not been studied under the molecular dynamics.

CHLOROPHYLL MEASUREMENT BY SPECTROSCOPY AND ITS BEHAVIOR TO DIFFERENT NITROGEN LEVELS

Andrés F. Rendón a*, Daniel Jaramillo a, Luis G. Vargas a, Alcides Montoya a.

a Grupo de investigación científica e industrial, Universidad Nacional de Colombia, Colombia * Autor de correspondencia: afrendona@unal.edu.co

Key words: Chlorophyll; spectroscopy; nitrogen; low cost.

Crop production in closed places has become an important key to the agricultural production giving a more stable and controlled environment than field crops, allowing improvements in growing time and product quality. Although, this kind of cultivation still shows some problems, such as nutrient deficiency by problems in the nutritive solution. One of these nutrients is the nitrogen, which is related to chlorophyll level. Considering that in a plant, chlorophyll is in charge of receiving photons and, through photochemical processes, produces its own aliment, the plant growing process is highly related to the amount of chlorophyll, therefor, nitrogen level. In order to control nitrogen levels and the measurement of chlorophyll optics, electronics and instrumentation were used in the study through a system based on reflection and absorption of light. This system was implemented to characterize the spectral response of the chlorophyll by different wavelengths, taking four different levels of nitrogen in four different plant groups. Plants grew in similar environments except for nitrogen level in their respective nutritive solution. The reflection and absorption measurements were taken with light sensors in the visible and infrared spectrum, reading and saving the data with a graphic interphase through a DAQ. This study showed important results not only in the relation of the chlorophyll with the nitrogen levels but also in the design of a low cost instrument to chlorophyll measurement.



DESEMPEÑO DE ELECTRODOS DE HIERRO Y ALUMINIO EN EL TRATAMIENTO DE EMULSIONES O/W MEDIANTE UN PROCESO DISCONTINUO DE ELECTROCOAGULACIÓN

Astrid C. Plata a, Edna M. Jaramillo a, Nancy A. Patiño a, Julio A. Pedraza-Avella a, Martín R. Cruz b.

^a Grupo de Investigación en Minerales, Biohidrometalurgia y Ambiente-GIMBA,

Universidad Industrial de Santander, Colombia.

b Facultad de Estudios Superiores-Cuautitlán, Universidad Nacional Autónoma de México, México.
* Autor de correspondencia: apedraza@uis.edu.co

Palabras Claves: Electrocoagulación; agua de producción; recobro químico; emulsiones O/W.

La electrocoagulación (EC) ha sido aplicada con éxito al tratamiento de emulsiones, y a la remoción de contaminantes disueltos y dispersos en diferentes efluentes industriales. En el presente trabajo se evaluó esta técnica como método para el tratamiento de emulsiones aceite en agua (O/W) provenientes de operaciones de recobro químico usando electrodos de hierro y aluminio.

Para el desarrollo experimental se prepararon emulsiones O/W sintéticas con características similares al agua de producción proveniente de recobro químico, utilizando aceite crudo proveniente de un campo petrolero colombiano, un surfactante aniónico comercial, salmuera y poliacrilamida parcialmente hidrolizada (HPAM). La evaluación se llevó a cabo en una celda convencional de operación discontinua a escala laboratorio, a una densidad de corriente de 0,0025 A/cm² y una distancia interelectródica de 3 cm, variando el tiempo de electrólisis (3 a 18 min), y la composición del electrolito (agua sintética con y sin HPAM), la variable de respuesta seleccionada fue el porcentaje de reducción de la turbidez.

Utilizando electrodos de hierro y agua sintética sin contenido de HPAM se alcanzó un porcentaje de reducción de la turbidez promedio de 70% y un máximo de 82% entre 9 a 12 min; caso contrario al agua sintética con HPAM, donde la turbidez aumentó en promedio 153%. Con electrodos de aluminio y la solución sin HPAM se logró una disminución de turbidez promedio de 28%; al usar solución sintética con HPAM, este valor promedio aumentó a 39%, alcanzando hasta un 83% a los 15 minutos de electrólisis.

Estos resultados conducen a que, para las condiciones establecidas en los experimentos, los electrodos de hierro mostraron mejor desempeño en la medida que no exista concentración residual de HPAM, caso contrario a los electrodos de aluminio.

QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS OF THE ANTICANCER ACTIVITY OF 5-(PYRIDIN-4-YL) SUBSTITUTED 1,3,4-OXADIAZOLES, 1,3,4-THIADIAZOLES, AND 1,2,4-TRIAZOLES

<u>Daniel S. Burbano-Riascos</u>^a, Cesar A. Mujica Martínez ^{a*}.

^a Grupo de Investigación en Fisicoquímica Básica y Aplicada – GIFBA, Departamento de Química,
Universidad de Nariño, Colombia
* Autor de correspondencia: cesarmujica@udenar.edu.co

Palabras Claves: QSAR; anticancer activity; 1,3,4-oxadiazole; 1,3,4-thiadiazole; 1,2,4-triazole.

Derivatives of pyridine, 1,3,4-oxadiazole, 1,3,4-thiadiazole, and 1,2,4-triazole cores have been found to exhibit diverse biological activity by its own. One important biological activity that is currently being pursued is anticancer activity, due to the different side effects of current chemotherapeutic agents. Recently, various compounds containing either 1,3,4-oxadiazole, 1,3,4-tiadiazole, or 1,2,4-triazole as main core and substituted with pyridin-4-yl in position 5 have been the synthesized and their anticancer activity determined. Specifically, these compounds exhibit cytotoxicity against human cancerous cells derived from gastric cancer, colon cancer, nasopharyngeal carcinoma, breast cancer, and liver cancer but they do not present cytotoxicity against normal cells. Due to the lack of a quantitative description based on molecular descriptors that allows the elucidation of the most important molecular features responsible for the anticancer activity, in the present work, a QSAR study is carried out. A mathematical model relating the anticancer activity with different molecular descriptors is proposed for each kind of cancerous cell. The best models were chosen according to the squared correlation and cross validation coefficients, which are greater than 0.6 and greater than or equal to 0.72, respectively. Optimization of the molecular properties that improve the anticancer activity is carried out based on the proposed models.



EXPERIMENTAL SETUP OF PFAL USING LED FOR HIGH PROTEIN FOOD PRODUCTION

Daniel Jaramillo^{a*}, Andrés F. Rendón^a, Luis G. Vargas^a, Alcides Montoya^a.

a Grupo de Instrumentación Científica e Industrial, Universidad Nacional de Colombia sede * Autor de correspondencia: djaramillop@unal.edu.co

Palabras Claves: LED; biomass; instrumentation; optics; PFAL.

Crop production in field, recently, is becoming more complicated by unusual weather, water shortages, and insufficient available land. Based on the problematic, a new concept was born, PFAL, which means Plant Factory with Artificial Lighting. It refers to a plant production facility with a thermally insulated and nearly airtight warehouse-like structure using LED. LED are increasingly being used in recently Plant Factories owing their compact size, low lamp surface temperature, high lighting efficiency and broad and defined light spectra, furthermore, they allow the possibility of evaluating the quantum yield of the photosynthesis (number of photochemical products per number of quanta absorbed) at different wavelengths. Optics, electronics and instrumentation of the developed system shown promising results and optimal behavior in the PFAL production of high protein food, also our experiments shown a special LED configuration and PFAL instrumentation for vegetables. The assembly of the PFAL took place in a dark room where the crop was built, also, different irrigation systems were used to compare its efficiency during the experiments. The instrumentation of each experiment system consisted on systematized controls of temperature, humidity, also (controlling pH and solution conductivity), and watering and energy expenditure. In addition, optics were used to transport, focus and obtain from LED their maximum of optical potency right into the plants, moreover to compare the efficiency of LED, another experiment, under the same conditions, took place on a greenhouse. Plants that obtained the highest absorption of light, in terms of efficiency, were those which were illuminated with wavelengths between 600nm-700nm, these plants showed more increment in its biomass than the others.

CARACTERIZACIÓN VOLTAMPEROMÉTRICA DEL CARÁCTER HI-DROFÍLICO -LIPOFÍLICO DE MATERIALES METÁLICOS EN MICROEMULSIONES O/W

Diana M. Jaimes-Campos a.b., Ronald A. Mercado-Ojeda a.b., Próspero Acevedo-Peña c., Julio A. Pedraza-Avella a.b.*. ^a Grupo de Investigación en Fenómenos Interfaciales, Reología, Simulación y Transporte - FIRST, Universidad. Industrial de Santander, Colombia ^b Grupo de Investigaciones en Minerales Biohidrometalurgia y Ambiente - GIMBA, Universidad. Industrial de Santander, Colombia ^c CONACyT- Instituto Politécnico Nacional, CICATA Legaria, México * Autor de correspondencia: apedraza@uis.edu.co

Palabras Claves: voltamperometría cíclica; electrodos; microemulsiones; crudo, hidrofilicidad.

Los desafíos tecnológicos direccionados a la producción de campos maduros han despertado el interés por los procesos de recobro químico del petróleo (CEOR, Chemical Enhanced Oil Recovery). La inyección de surfactantes como parte del proceso reduce la tensión interfacial (IFT, Interfacial Tension), lo que permite optimizar el desplazamiento del aceite hacia los pozos productores. Sin embargo, el estado microemulsionado del fluido recuperado por las fuertes interacciones electrostáticas agua – crudo – surfactante, ha dificultado la separación del aceite libre por los métodos convencionales implementados en campo.

El presente trabajo de investigación propone la desestabilización electroquímica de microemulsiones proveniente de recobro químico tipo Winsor I. Para ello, se evaluó el carácter hidrofílico – lipofílico de diferentes materiales (A36, AISI 316L, CuZn37, Ti6Al4V y Ti) en una celda convencional de tres electrodos. Como estrategia electroquímica se usó la prueba de voltametría cíclica (VC) y un sistema electroquímico modelo de Ferricianuro de Potasio (K3Fe(CN)6) 1mM y Ferroceno (Fe(C5H5)2) 1mM, por ser moléculas hidrofílicas – lipofílicas, respectivamente. Todos los barridos de potencial iniciaron en el potencial de circuito abierto (OCP) hacia la dirección anódica a 10 mV/s. Los electrodos de acero A36, acero inoxidable AISI 316L y latón fueron descartados por la disolución del metal, presencia de corrosión por picadura y descincado de la aleación, respectivamente. Así mismo, el electrodo de Ti6Al4V se excluye debido a la formación natural de óxido en su superficie que interfiere con la técnica electroquímica escogida. El Ti es el material que presenta una mejor estabilidad en contacto con el sistema de estudio, sin embargo, su afinidad al crudo se convierte en un problema potencial. Los resultados obtenidos sugirieron explorar opciones para modificar el carácter lipofilico del Ti pues, en el mejoramiento de la calidad del agua de producción y aumento de la cantidad crudo recuperado en superficie, resulta necesario la interacción del electrodo de trabajo con la fase acuosa presente en la microemulsión o/w.



QSAR STUDY OF ANTIFUNGAL AGENTS CONTAINING THE PIPERIDINE, 1,2,3-TRIAZOLE, AND 1,2,4-OXADIAZOLE CORES

Nora E. Eraso-Benavides a, Cesar A. Mujica Martínez a*.

^a Grupo de Investigación en Fisicoquímica Básica y Aplicada – GIFBA, Departamento de Química,
Universidad de Nariño, Colombia
* Autor de correspondencia: cesarmujica@udenar.edu.co

Palabras Claves: QSAR; anticancer activity; 1,3,4-oxadiazole; 1,3,4-thiadiazole; 1,2,4-triazole.

Heterocyclic cores such as 1,2,3-triazole, 1,2,4-oxadiazole, and piperidine exhibit a broad pharma-cological activity, and therefore, they are active structural cores of a significant number of commercial medicaments. Looking for molecular systems with broad spectrum, new compounds integrating all the mentioned cores have been synthesized and evaluated as antifungal agents against *Candida albicans*, *Fusarium oxysporum*, *Aspergillus flavus*, *Aspergillus niger*, and *Cryptococcus neoformans*. In the present work, a QSAR study is carried out in order to identify the most important molecular parameters responsible for the observed biological activity. The results of the multilinear regression employing molecular descriptors allow the elaboration of mathematical models that exhibit values of the square of the correlation coefficient superior to 0.8. The validation is made in terms of the square of the correlation coefficient of crossed validation, obtaining, for the best models, values superior to 0.72. Additionally, the quotient PRESS/SSY for the best models is less than 0.4, which means that the proposed models are reliable and have a predictive power. The obtained models allow to identify structural modifications that can result in improved antifungal activity.

QSAR STUDY OF THE ANTIFUNGAL ACTIVITY OF PIPERAZINE SUBSTITUTED 1,2,4-TRIAZOLES

Manuel E. Gustin-Villota^a, Cesar A. Mujica Martínez ^{a*}.

^a Grupo de Investigación en Fisicoquímica Básica y Aplicada – GIFBA, Departamento de Química, Universidad de Nariño, Colombia * Autor de correspondencia: cesarmujica@udenar.edu.co

Palabras Claves: QSAR; antifungal activity; 1,2,4-triazole; candida albicans; candida paropsiolosis.

The heterocyclic compounds that have in their structure a 1,2,4-triazol ring have been studied for their varied spectrum of biological activities, among which the antifungal activity stands out. The enzymatic action of triazoles is carried out directly on the isoenzyme lanosterol-14α-demethylase (CYP51) as a competitive inhibitor in the biosynthesis of fungal ergosterol, an essential component of the fungi cell membrane. Likewise, the piperazine core exhibits a diverse biological activity, in particular, anthelmintic action. Recently, several 1,2,4-triazole derivatives with a chain of 4-(4-phenyl substituted) piperazine that exhibit antifungal action against *candida albicans* and *candida paropsiolosis* have been obtained. In order to understand the molecular features responsible of the antifungal activity, a quantitative structure-activity relationship study was carried out in this work. Different thermodynamic and physicochemical descriptors were determined. The proposed models satisfy the validation parameters with values of Q² greater than 0.8 and PRESS/SSY less than 0.2. The effect of the substituent aliphatic chain of the heterocyclic derivatives on the antifungal activity was evaluated, obtaining an ideal number of five carbon atoms as the chain with the highest activity against *candida albicans*. Also, alternative substituents with improved activity are proposed.



ELECTRODOS SERIGRAFIADOS DE AZUL DE PRUSIA MODIFICADOS CON ÓXIDO DE GRAFENO Y PEROXIDASA DE PASTO GUINEA (PANICUM MAXIMUM) PARA DETECCIÓN ELECTROQUÍMICA DE STAPHYLOCOCCUS AUREUS

Paula Guarín a, Jonathan Cristancho a, John J. Castillo a*.

^a Grupo de Investigación en Bioquímica y Microbiología, GIBIM, Universidad Industrial de Santander,

Bucaramanga, Colombia.

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

Palabras Claves: Electrodos serigrafiados; azul de prusia; peroxidasa; bacterias.

La presencia de bacterias patógenas en los alimentos se ha convertido en una amenaza potencial para la salud de la población mundial y para la economía de las industrias productoras de alimentos. Es por eso que el aumento en la demanda del número de métodos de detección sensible y rápida de éstas bacterias es de suma importancia. Este estudio presenta la integración de un nanobioconjugado de óxido de grafeno (OG) con peroxidasa de pasto guinea (PPG) y electrodos serigrafiados de azul de Prusia para la detección electroquímica de *Staphylococcus aureus*. El nanobiocojugado OG-PPG fue caracterizado por espectroscopia Raman exhibiendo una diferencia en la relación de intensidades de las bandas D y G. La superficie del electrodo fue previamente modificada con carbodiimida (EDC) e hidroxisuccinimida (NHS) para inmovilizar covalentemente el OG-PPG al electrodo y caracterizada electroquímicamente con voltamperometría cíclica. La disminución en la corriente de reducción electrocatalítica de una concentración de peróxido de hidrogeno 1x10⁻³ M sirvió para lograr la determinación de S. aureus en un rango de concentraciones entre 3x10² y 3x10⁸ ufc mL⁻¹. El sistema electroquímico desarrollado podría ser potencialmente usado como una herramienta analítica de diagnóstico rápido para muestras contaminadas con agentes patógenos.

DETECCIÓN RÁPIDA DE STAPHYLOCOCCUS AUREUS USANDO UN BIOSENSOR ELECTROQUÍMICO DE ELECTRODOS SERIGRAFIADOS DE ORO MODIFICADOS CON CISTEÍNA Y PEROXIDASA DE PASTO GUINEA (PANICUM MAXIMUM)

Paula Guarín^a, Jonathan Cristancho^a, Herminsul Cano^b, John J. Castillo^{a*}.

^a Grupo de Investigación en Bioquímica y Microbiología, GIBIM, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.

^b Grupo de Investigación en Fisicoquímica Teórica y Experimental, GIFTEX, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.

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

Palabras Claves: Bacterias; peroxidasa; biodetección; peróxido de hidrógeno

La presencia de microorganismos patógenos en muestras de alimentos y/o aguas de consumo humano es un problema de salud pública debido al elevado número de muertes causados por enfermedades relacionadas con bacterias, virus, hongos, etc. Existe un enorme interés en el desarrollo de metodologías analíticas novedosas y confiables que permitan llevar a cabo diagnósticos rápidos, in situ y confiables. A pesar de la efectividad y robustez de los métodos tradicionales existentes todavía existen desventajas relacionadas con el consumo de tiempo en los análisis y resultados, además de los costos que implican un análisis completo y confiable. Una alternativa para superar estas desventajas la ofrecen los métodos electroquímicos, principalmente los biosensores. En este trabajo se presenta un novedoso biosensor para la determinación rápida de Staphylococcus aureus mediante el consumo de peróxido de hidrógeno (H₂O₂) por parte de las catalasas presentes en la S. aureus y detectado por electrodos de oro modificados con la peroxidasa de pasto guinea (Panicum maximum). Por medio de voltamperometría cíclica se logró encontrar una dependencia directa entre la disminución en la corriente de reducción del H₂O₂ con un aumento en la concentración de S. aureus. Esto nos permitió detectar la presencia de la bacteria en muestras de leche contaminadas con éste microrganismo mostrando un nivel mínimo de detección de 3x10² ufc mL⁻¹. El tiempo de respuesta del biosensor en la detección de la bacteria fue de aproximadamente 60 segundos. El biosensor electroquímico desarrollado se constituye en una potencial herramienta bioanalítica para un diagnóstico rápido de bacterias presentes en muestras contaminadas de alimentos.



DISEÑO, ESTUDIO TEÓRICO Y CORRELACIÓN DE LAS PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y ÓPTICAS DE DERIVADOS DE BENZODIETINILTIOFENOS COMO POTENCIALES CELDAS FOTOVOLTAICAS

Melissa Suárez-Jiménez ^a, Carolina Caicedo ^b, Edwin Florez-López ^c, Yenny Ávila-Torres ^{c*}.

^a Grupo QCOAMMSB. Programa de Química Industrial. Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.

^b Centro de Investigación en Química Aplicada. Saltillo, Cuahuila, México.

^c Grupo QUIBIO. Facultad de Ciencias Básicas. Universidad Santiago de Cali. Pampalinda, Cali, Colombia.

*Autor de correspondencia: yennytorres@usc.edu.co

Palabras Claves: Materiales fotosensibles; sustitución *orto*; sustitución *meta*; sustitución *para*; benzodietiniltiofenos.

Entorno a energías renovables, en la actualidad se busca sintetizar compuestos orgánicos que capten la energía solar y la conviertan en eléctrica con propiedades equiparables a materiales inorgánicos de la misma clase. Es un reto sintético importante ya que los modelos actuales existentes presentan falta de eficiencia en la conversión energética; los materiales inorgánicos tienen hasta un 30% de eficiencia y los materiales orgánicos reportan eficiencias alrededor del 17%. Los materiales orgánicos deben presentar requisitos estructurales tales como: sistemas π conjugados, flexibilidad mecánica y absorción en la región del visible.

En este contexto, se diseñaron y optimizaron moléculas orgánicas de bajo peso molecular y su interacción con un ácido de Lewis, derivadas de la familia dietinilfeniltiofeno de forma teórica por medio de la teoría del funcional de la densidad (por sus siglas en inglés DFT) con B3LYP 6-31g (d,2p) en Gaussian 09. Estas se encuentran denomindas como: compuestos lineales precursores (\mathbf{T} y \mathbf{Z} n \mathbf{T}) y seis nuevos macrociclos (\mathbf{p} - \mathbf{P} D \mathbf{T} , \mathbf{m} - \mathbf{P} D \mathbf{T} , \mathbf{p} - \mathbf{Z} n \mathbf{P} D \mathbf{T} , \mathbf{m} - \mathbf{Z} n \mathbf{P} D \mathbf{T} y \mathbf{o} - \mathbf{Z} n \mathbf{P} D \mathbf{T}). Se estimaron para todas las moléculas parámetros geométricas, electrónicas, ópticas y fotovoltaicas teóricos. Los mejores parámetros fotovoltaicos teóricos se describieron para la molécula \mathbf{p} - \mathbf{P} D \mathbf{T} con PCE 26.18%, Jsc = 14.79 mA.cm² y Δ E_{gap} = 2.66 eV. La influencia del ión Zn(II) como ácido de Lewis mejora la distribución electrónica entre donador y aceptor, aporta rigidez al sistema favoreciendo las propiedades ópticas y electrónicas, con valores de PCE superiores al 11% y Δ E_{gap} menores a 1.8 eV.

Finalmente, con el propósito de validar el método teórico usado (DFT-B3LYP 6-31g (d,2p) en esta familia de moléculas, se eligió la molécula lineal **T**, la cual fue sintetizada y caracterizada química, espectrocópica y electroquímicamente mostrando valores experimentales para los parámetros electrónicos y ópticos que se correlacionan alrededor del 9% con los valores teóricos obtenidos. Estos resultados sugieren que el método computacional para los parámetros ópticos y electrónicos puede ser usados en esta familia de moléculas de benzodietiniltiofenos.

EVALUACIÓN DEL DESEMPEÑO ELÉCTRICO DE UNA CELDA DE COMBUSTIBLE DE METANOL DIRECTO NO COMERCIAL

Mario A. Mora-Montenegro a, Marlon G. Riascos-Vallejo a, Alfredo Calderón-Cárdenas a, Cesar A. Mujica-Martínez a*. ^a Grupo de Investigación en Fisicoquímica Básica y Aplicada – GIFBA, Departamento de Química, Universidad de Nariño, Colombia * Autor de correspondencia: cesarmujica@udenar.edu.co

Palabras Claves: Celda de combustible; metanol; desempeño eléctrico; electro-oxidación.

Desde el punto de vista energético y ambiental, el desarrollo de dispositivos de conversión de energía busca aumentar su eficiencia y tornarlos lo menos contaminantes posible. Las celdas de combustible de metanol directo son conversores de energía química a energía eléctrica con una eficiencia termodinámica muy alta y con emisiones de CO, mucho más bajas comparadas con aquellas que se producen cuando el combustible es utilizado en motores de combustión. En el presente trabajo se muestran resultados de la construcción y evaluación electroquímica de una celda de combustible de metanol directo como función de la concentración de metanol, la carga de catalizador en los electrodos y la geometría de los canales de alimentación. A través de un diseño experimental se encontraron las mejores condiciones que optimizan el desempeño eléctrico de la celda de combustible en términos de la eficiencia y la potencia eléctrica máxima.



TAUTOMERIC EQUILIBRIA IN β- KETONITRILES: COMPUTATIO-NAL THERMODYNAMICS AND KINETICS

Luis F. Mera-Grandas a, Fausto A. Salazar-Rodríguez a, Cesar A. Mujica-Martínez a*.

^a Grupo de Investigación en Fisicoquímica Básica y Aplicada – GIFBA, Departamento de Química, Universidad de Nariño, Colombia

* Autor de correspondencia: cesarmujica@udenar.edu.co

Palabras Claves: β-Ketonitriles; keto-enol tautomerism; keto-ketenimine tautomerism; computational chemistry; DFT.

Several kinds of tautomeric equilibria are known, which affect the reactivity of the molecules undergoing such equilibria. In general, tautomerism can be considered as a special type of isomerism involving the movement of an atom, resulting in changes in the molecular structure and properties of the isomers involved. A single molecular structure can, in principle, exhibit several tautomeric equilibria. In particular, \(\beta\)-ketonitriles are molecular systems with a carbon atom bonded simultaneously to a nitrile and a carbonyl, which could result in keto-enol or in keto-ketenimine equilibria due to the α-hydrogen. Experimentally, it has been found that the keto-enol is the main equilibria obtaining the relative amounts of both isomers by nuclear magnetic resonance spectroscopy. In this work, computational results based on density functional theory are used to quantitatively determine the molecular characteristics that favor the different tautomeric forms in various solvents, as well as to obtain thermodynamic and kinetic parameters. Specifically, the character of the transition state and the synchronicity of the tautomerization process are determined by examining the relative variation of the bond indices, and the rate constants are determined through the Eyring-Polanyi equation. Predictions of the tautomeric equilibria of β-ketonitriles bearing different substituents are reported.

ESTUDIO DE ADUCTOS FULLERÉNICOS A PARTIR DE ÉSTERES MALÓNICOS DE TRIETILENGLICOL Y C_{60} : PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y ELECTROQUÍMICAS

Nathalia Cajiao a, Jóse D Velasquez a, Manuel N Chaur a*.

^a Síntesis y Mecanismos de Reacción en *Química Orgánica (SIMERQO), Universidad del Valle, Colombia* * Autor de correspondencia: manuel.chaur@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Celdas solares basadas en perovskitas; reacción de Bingel-Hirsch; dumbbellfullereno; trietilenglicol.

Las celdas solares basadas en perovskitas se han convertido en un nuevo tipo de tecnología fotovoltáica muy prometedor debido a su bajo costo, facilidad de fabricación y alta eficiencia de conversión de energía. En estas celdas, los derivados fullerénicos son los materiales transportadores de electrones más utilizados, entre los cuales se destacan aquellos que presentan unidades de trietilenglicol (TEG), como los desarrollados por Shao *et al.* [1] y Collavini *et al.* [2]. Estos derivados muestran un buen rendimiento en la celda, 15.7 y 16.41%, respectivamente, y resistencia a la humedad, evitando que la perovskita se degrade. Por otro lado, los compuestos diméricos de fullereno, como el D-60 [3] que extrae y transporta electrones de manera eficiente, hace que el rendimiento de la celda incremente. No obstante, estos compuestos diméricos han sido poco estudiados como material transportador de electrones.

En este orden de ideas, se propone la síntesis de un aducto dumbbellfullerénico mediante la reacción Bigel-Hirsch de ésteres malónicos de trietilenglicol y C₆₀, como posible material transportador de electrones, obteniendo rendimientos del 28.5%. Estas propiedades se comparan respecto al derivado equivalente monofullerénico. Posteriormente, se estudian propiedades fotofísicas a través de UV-Vis y fluorescencia; electroquímicas mediante voltamperometría cíclica y espectroscopia de impedancia electroquímica; y de la estabilidad térmica de los aductos mediante TGA y DSC.

- [1] Collavini, S.; Saliba, M.; Tress, W, et al. ChemSusChem 2018, 11 (6), 1032–1039.
- [2] Shao, S.; Abdu-Aguye, M.; Qiu, et al. Energy Environ. Sci. 2016, 9 (7), 2444–2452.
- [3] Tian, C.; Kochiss, K.; Castro, E, et al. J. Mater. Chem. A 2017, 5 (16), 7326–7332.



ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LA DESCOMPOSICIÓN TÉRMICA DE ALGUNOS COMPUESTOS DEL TIPO OXI-PROPENOS

Pablo A. Ruiz a*, Jairo Quijano a, Eduardo Chamorro b.

^a Laboratorio de Fisicoquímica Orgánica, Universidad Nacional de Colombia, Medellín-Colombia

^b Departamento de Ciencias Químicas, Universidad Andrés Bello, Santiago de Chile-Chile

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

Palabras Claves: 2-butoxipropeno; 2-etoxipropeno; 2-(1-metiletoxi) propeno; descomposición térmica; reacción unimolecular.

En este trabajo se estudió computacionalmente la reacción de descomposición térmica de 2-(1-metiletoxi) propeno, 2-etoxipropeno y 2-butoxipropeno, como un aporte al entendimiento del mecanismo de reacción para este tipo de compuestos. Se evaluó el efecto del grupo metil sobre el carbono vinílico, se investigó acerca de la naturaleza del estado de transición involucrado, se obtuvieron los parámetros cinéticos y termodinámicos de las reacciones, las cargas atómicas y la sincronicidad de los procesos involucrados.

Todos los cálculos fueron realizados con el paquete computacional Gaussian 09, con el método M06-2X/6-311+G(d,P), a cinco temperaturas, dentro del rango de 600–640 K. El mecanismo estudiado consiste en una reagrupación intramolecular con una transferencia de hidrógeno 1-5, a través de un estado de transición cíclico de 6 miembros, los productos son acetona y la olefina correspondiente, según se muestra en la Fig. 1.

Figura 1. Mecanismo de reacción estudiado

Existe un buen acuerdo de las constantes de velocidad experimentales con las calculadas. El grupo metilo en el carbono 4 de la molécula estabiliza el estado de transición. Se encontró que los estados de transición modelados son estructuras simétricas energética y geométricamente. Los cálculos de sincronicidad de las reacciones permitieron postular que éstas son concertadas y sincrónicas.

EVALUACIÓN DE LOS GENES QUE CODIFICAN PARA HSP (HEAT SHOCK PROTEIN) EN PLÁNTULAS DE ARROZ

Rodolfo E. Arce a*, Cindy J. Martínez a, Luis F. Becerra a.

a Centro de Investigación Biomolc, Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Colombia * Autor de correspondencia: rearcel@correo.udistrital.edu.co

Palabras Claves: Proteínas de choque térmico; estrés térmico; Oryza sativa; termotolerancia.

Se evaluó la expresión de los genes que codifican las proteínas de choque térmico sHsp's, Hsp70 y Hsp90 en variedades de *Oryza sativa*: Fedearroz 473, Fedearroz Mocarí y Línea avanzada Lv1645 irradiadas con ⁶⁰Co. Se realizaron cultivos hidropónicos y una vez se alcanzó el estadio de plántula fueron sometidas a estrés térmico: tratamiento de estrés (T1) a 35°C y un tratamiento de estrés (T2) a 42°C durante un día. Durante cada tratamiento se realizaron extracciones de ARN y proteínas totales en tres momentos diferentes: 11:10, 13:10 y 15:10. El ARN se cuantifico a través de Thermo Scientific NanoDrop 2000c y por medio de q-RT-PCR se realizó una cuantificación absoluta de los genes de interés; para la cuantificación de proteínas se utilizó en método de Bradford y se realizaron geles de SDS-PAGE al 12.5%, con lo que se obtuvo que los tres genotipos F473, Mocarí y Lv1645 no presentan diferencias significativas en el crecimiento de las plántulas durante las cuatro horas de exposición al estrés térmico, por otro lado una dosis de ⁶⁰Co genera alteraciones físicas en las variedades Mocarí y Ly1645. La expresión de los genes que codifican a proteínas de choque térmico en los tres genotipos, incrementa a medida que aumenta la temperatura como mecanismo de protección de la plántula y la expresión de estos genes está relacionada con la tolerancia a altas temperaturas, siendo F473 tolerante, Mocarí resistente y Lv1645 susceptible. Las proteínas que presentan mayor intensidad corresponden a 50 kDa, siendo está las proteínas glutelinicas.



COMPUTATIONAL STUDY OF THE KETO-ENOL TAUTOMERISM IN **B-KETOAMIDES**

Fausto A. Salazar-Rodríguez a, Luis F. Mera-Grandas a, Cesar A. Mujica-Martínez a*.

a Grupo de Investigación en Fisicoquímica Básica y Aplicada – GIFBA, Departamento de Química, Universidad de Nariño, Colombia * Autor de correspondencia: cesarmujica@udenar.edu.co

Palabras Claves: Keto-enol tautomerism; β-Ketoamides; computational chemistry; thermodynamic parameters; kinetic parameters.

Tautomerism is a special type of isomerism involving the movement of an atom, resulting in changes in the molecular structure and properties of both isomers. One of the best-known tautomeric equilibria is the keto-enol, where carbonyl compounds, which have hydrogen atoms in their alpha carbons, quickly interconvert into their corresponding enols. Experimentally, the existence of different tautomeric forms can be studied by using mass spectrometry and nuclear magnetic resonance spectroscopy. β-ketoamides are compounds that, in principle, have several tautomeric equilibria, but the most important is the keto-enol tautomerism. The relative amounts of the keto and enol isomers for these compounds, in polar solvents at various temperatures, were determined experimentally by NMR. However, these results were explained qualitatively in terms of steric effects and substituent groups. In this work, computational tools are used to quantify the different molecular parameters that favor the different tautomeric forms, as well as to obtain thermodynamic and kinetic parameters. Specifically, density functional theory is used to obtain equilibrium geometric structures, energetics, and thermodynamic parameters of the different tautomers and the transition state. The rate constants are determined through the Eyring-Polanyi equation. The character of the transition state and the synchronicity of the tautomerization process are determined by examining the relative variation of the bond indices. Results indicate an early transition state and an asynchronous tautomerization mechanism.

SEGUIMIENTO ELECTROQUÍMICO DE LA DEGRADACIÓN OXIDATIVA DE GLIFOSATO CON UV/H,O,

Libia Vielma Balanta ^a, Jairo Nelson Quiñonez ^a, Sandra P. Castro ^{a*}.

^a Grupo de Investigación en Electroquímica y Medio Ambiente, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad Santiago de Cali, Pampalinda, Santiago de Cali, Colombia

* Autor de correspondencia: sacastro@usc.edu.co

Palabras Claves: Voltamétria; glifosato; complejo; oxidación UV/H₂O₂.

En Colombia el herbicida glifosato se utiliza ampliamente en la agricultura para acelerar la maduración de frutas y para inhibir el crecimiento de pastos, hierbas de hoja ancha y plantas leñosas. Dada sus efectos entre 10% al 14% de su aplicación se utiliza para la erradicación de coca y amapola. La inadecuada disposición de los recipientes que contienen el herbicida hace que restos del mismo puedan contaminar las fuentes hídricas o a los sitios donde se hace disposición final de los mismos. Es necesario encontrar una manera rápida, accesible a personal no calificado y a bajo costo que permita hacer un adecuado manejo de los restos del herbicida. Muchos equipos de investigación en todo el mundo se han centrado en la búsqueda de alternativas y tecnologías para el análisis y tratamiento de compuestos tóxicos persistentes orgánicos en el medio ambiente como el glifosato y entre ellas se cuenta la oxidación avanzada con peróxido de hidrógeno y UV.

En este estudio se optimiza un método voltamétrico para el estudio sensible y confiable del herbicida glifosato (N-(fosfonometil) glicina) y su degradación oxidativa con H₂O₂/UV. Se utilizó la voltamétria cíclica para la caracterización del herbicida y la cronoamperometria para su cuantificación. La celda consistió de tres electrodos en un compartimiento, alambre de plata recubierto con cloruro de plata como electrodo de seudo referencia, electrodo de platino como electrodo de trabajo y acero inoxidable como electrodo auxiliar. El análisis ciclovoltamétrico sugiere la formación de un complejo glifosato-Pt sobre la superficie del electrodo con mejor señal en ácido perclórico entre 1,3V a -1,3V; es sensible a la protonación del grupo amino, no se observa respuesta a valores de pH superiores a 5,0. La superficie electródica requiere limpieza entre medidas para garantizar una desviación estándar relativa (DSR) de 4,0%. El herbicida presentó dos rangos lineales, que van entre 85 μM y 93 mM rango alto 8,6 μM y 80 μM rango bajo, un límite de detección de 0,326μM y un límite de cuantificación de 14,53 μM.

La degradación oxidativa del glifosato con H_2O_2/UV se favorece a pH 3,0, exhibe cinética de speudo primer orden con una vida media de 40 ± 4 min. Se estiman dos rutas degradativas dependiendo de la concentración del H_2O_2 : a concentraciones bajas (relación H_2O_2 /glifosato 1:100), se favorece la formación de sarcosina y luego glicina; a relaciones H_2O_2 /glifosato 1:20; 1:10 se favorece la formación de glicina.



CRECIMIENTO DE NANOFIBRAS PVAL-OH, PARA EL ENCAPSULAMIENTO DE ACEITE ESENCIAL DE *CÚRCUMA LONGA* UTILIZANDO ELECTROHILADO

Angie L. Salazar a*, José H. Castillo a, Leonardo Padilla Sanabria c, Luis R. Vargas a,b.

^a Grupo de Física de Materiales Inorgánicos y Orgánicos, Universidad del Quindío, Colombia

^b GYMOL Grupo de Inmunología Molecular, Universidad del Quindío, Colombia

^c Director centro de investigaciones Biomédicas, Universidad del Quindío

*Autor de correspondencia: alsalazaro@uqvirtual.edu.co

Palabras Claves: Nanotecnología; nanofibras; encapsulamiento, cúrcuma longa.

La antibioticorresitencia se ha convertido en un tema de interés, debido a la alta morbilidad y mortalidad generada por microorganismos tales como E. Coli, Candida Albicans y S. Aereus. Los productos naturales se convierten en una alternativa para contrarrestar dicho fenómeno. Se tiene conocimiento que muchos alimentos, como zumos de frutas, vegetales y compuestos farmacológicos, pierden su actividad biológica por la oxidación cuando se expone al ambiente, esto se puede contrarrestar utilizando técnicas como la microencapsulación. El aceite esencial de Cúrcuma longa ha demostrado ser un potente antimicrobiano, por lo cual es un buen candidato. En este trabajo, se pretende obtener fibras poliméricas de PVAL-OH con aceite esencial de Cúrcuma longa. Primero se realizaron evaluaciones de concentración de inhibición del crecimiento microbiológico, utilizando concentraciones de 5, 2.5, 1.25 y 0.5% del aceite de *Cúrcuma longa*. Para la encapsulación del fármaco en las nanofibras se preparó una solución polimérica de PVAL-OH, donde se disuelve 1 gramo de polímero en 20 ml de agua milli-Q, para lograr la homogenización de la solución se utilizará un agitador magnético durante 1 hora manteniendo una temperatura de 150°c, una vez disuelto el polímero a 300 rpm, la solución se lleva a temperatura ambiente bajo agitación durante 2 horas adicionales, del mismo modo se prepara una solución polímero-fármaco. La mezcla homogénea se invecta mediante un sistema de aguja, en una recámara cerrada que se mantiene bajo condiciones de equilibrio térmico y mecánico, se aplica una diferencia de potencial de 25 kV entre aguja-colector, una humedad relativa del 30%, velocidad de invección de 4 µL/h, y un tiempo de crecimiento de 1 hora hasta obtener un parche aproximadamente de 1 ml de espesor. A través de SEM se evaluaron las características de las fibras con y sin fármaco. Se obtiene distribución de diámetros homogéneos de las fibras, con valores promedio entre 90 y 100 nm. Mediante la técnica de espectroscopia UV-vis, se identifica un pico de absorción del aceite de Cúrcuma para una longitud de onda 310 nm, permitiendo identificar que el fármaco se retiene en las nanofibras poliméricas

ANÁLISIS VOLTAMÉTRICO DE DICLOFENACO CON ELECTRODOS DE GRAFITO QUÍMICAMENTE MODIFICADOS

José A. Espitia a, Giovanni Rojas J. a, Sandra P. Castro N. b, Alonso Jaramillo A. a, b*.

^a Universidad Icesi, Cali, Colombia

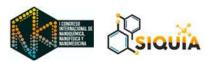
^b Grupo de Investigación en Electroquímica y Medio Ambiente (GIEMA), Universidad Santiago de Cali,

Pampalinda, Cali, Colombia * Autor de correspondencia: aloja12@yahoo.com

Palabras Claves: Voltamétria, diclofenaco, electrodo modificado sensibilidad, PEDOT.

La búsqueda de aplicaciones de los electrodos químicamente modificados es un área activa en diferentes campos científicos y tecnológicos. La investigación realizada implicó la modificación superficial de un electrodo de carbono vítreo con el polímero PEDOT (Poly(3,4-ethylenedioxythiophene). Se estableció las condiciones electroanalíticas que proporcionaron una respuesta sensible, reproducible y confiable del analito diclofenaco, (DCF, ácido 2-[(2,6-diclorofenil) amino] fenilacético; una droga no esteroidal para el tratamiento del dolor e inflamación asociada con la artritis. La polimerización de una solución 10.0 mM del monómero EDOT en la superficie del sensor se realizó por cronocoulombimetría, controlando el tiempo de electrólisis.

Se utilizó voltametría cíclica, (CV), y voltametría de pulso diferencial, (DPV) para caracterizar el electrodo desnudo de carbono vítreo y modificado con el polímero PEDOT. El electrólito de soporte fue una solución 0.10 M de buffer fosfato pH 8.00. Los límites de detección con el electrodo desnudo y polimerizado fueron en su orden 1.37 µM y 9.06 nM respectivamente. El electrodo de trabajo modificado se empleó en la determinación de DCF en una preparación farmacéutica de 50 mg, obteniendo un resultado de 49.8 mg siendo el error de 0.4%. Los resultados obtenidos en este estudio compiten favorablemente tanto en parámetros analíticos como económicamente con la cromatografía líquida de alta eficiencia, HPLC empleada comúnmente en los laboratorios farmacéuticos.



ELECTROSÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE PELÍCULAS DELGADAS DE MOF SOBRE DIVERSOS SUBSTRATOS Y EVALUACIÓN DE LAS MISMAS EN LA DETECCIÓN DE AMONIACO

Jafet I. Sierra a, Oscar Rodríguez B. b*.

^a Estudiante Carrera de química, Universidad Nacional de Colombia, Colombia
^b Profesor Asociado, Departamento de química, Universidad Nacional de Colombia, Colombia
*Autor de correspondencia: orodriguez@unal.edu.co

Palabras Claves: Electrosíntesis; EIS; MOF-199; MOF-5; CV.

En este trabajo se presenta la síntesis, por vía electroquímica, de películas delgadas del MOF-199 y del MOF-5, sobre la superficie de electrodos de cobre, y zinc respectivamente, y sobre la superficie de un electrodo de ITO para ambos casos. Se realizó la síntesis de dichos compuestos por este método debido a la posible aplicación de las películas de MOF en la detección de amoniaco o de aminas de bajo peso molecular. Se utilizó un método potenciostático y uno cronoamperométrico, empleando celdas de tres electrodos, con soluciones de nitrato de postasio o hexafluorofosfato de tetrabutilamonio como electrolitos (según el medio), en proporción de 2 a 1 con la concentración del "linker" empleado, que, para el caso del MOF-199, es el ácido 1,3,5-benzentricarboxilico(BTC), y para el MOF-5 es el ácido 1,4-benzendicarboxilico (BDC). El potencial aplicado se escogió con base a voltamperometrías cíclicas (CV) realizadas bajo las condiciones de síntesis mencionadas en cada caso. El área del electrodo de trabajo en todos los casos fue de 25 mm².

La caracterización de las películas formadas se realizó empleando principalmente DRX, donde se compararon los difractogramas obtenidos, con los reportados en literatura, y con los obtenidos para los mismos MOF pero en forma de polvo, los cuales, fueron sintetizados por vía solvo-térmica, encontrándose una correspondencia entre estos. La morfología de las películas sintetizadas se estudió mediante microscopía electrónica de barrido. Adicionalmente, como metodología para la caracterización del proceso de síntesis, se hizo un estudio mediante espectroscopia de impedancia electroquímica (EIS) en un rango de potencial entre -0.8 a 1.5V y en un rango de frecuencias de 1MHz hasta 0.1Hz.

Finalmente se hicieron pruebas de detección de amoniaco en solución acuosa. Se utilizó la EIS como herramienta de medición. Se midió la impedancia al poner las películas delgadas de MOF en contacto con soluciones de amoniaco entre 1 y 50ppm. Se encontró que la respuesta es lineal en este rango de concentraciones y que se puede detectar la presencia de amoniaco aun a muy bajas concentraciones.

MODIFICACIÓN SUPERFICIAL DE LÁMINAS DE ACERO MEDIANTE LA TÉCNICA DE OXIDACIÓN ELECTROLÍTICA CON PLASMA PARA APLICACIONES EN PROCESOS DE OXIDACIÓN AVANZADA

Fernando Gordillo-Delgado a, Natalia Rodríguez Quesada a*, Daniel Iván Rey Cepeda a. ^a Grupo de Investigación en Ciencia Aplicada para el Desarrollo de la Ecorregión-GICADE;

adscrito al Instituto Interdisciplinario de las Ciencias, Universidad del Quindío, Colombia. * Autor de correspondencia: nrodriguezq 1@uqvirtual.edu.co

Palabras Claves: Oxidación electrolítica con plasma; acero; procesos de oxidación avanzada.

La oxidación electrolítica con plasma es una técnica electroquímica que proporciona una película de óxido sobre la superficie de los electrodos; en algunos casos esto mejora la resistencia al desgaste y a la corrosión del metal utilizado. Sin embargo, algunos de estos recubrimientos pueden ser usados en procesos de oxidación avanzada (POA), lo que resulta oportuno teniendo en cuenta que cada vez es más alta la demanda de tratamiento de agua contaminada y que el uso de este tipo de materiales evita la recuperación y reactivación de reactivos. Los POA permiten oxidar sustancias orgánicas a temperaturas relativamente bajas, especialmente en presencia de oxígeno y peróxido de hidrógeno, bajo exposición a la radiación solar; esto los hace viables para aplicaciones específicas. En particular, durante el beneficio del café se producen aguas residuales con alta carga contaminante, alta demanda química y biológica de oxígeno y pH bajo, lo que las convierte en un problema medioambiental relacionado con la sostenibilidad de esta actividad agrícola. En este trabajo se usaron dos electrodos-sustratos, uno de acero (Stainless Steel 304) y el otro de titanio (ASME SB 265 de grado 2), conectados durante 25 minutos a una fuente de alimentación de voltaje constante que proporciona tensiones hasta de 750 V y corriente continua máxima de salida de 3 A. Se utilizó difracción de rayos X y microscopía electrónica de barrido para estimar la estructura y morfología de cada revestimiento y con espectroscopía fotoacústica se estudiaron sus características ópticas. Para determinar la eficiencia del material en el POA del agua residual se hicieron pruebas de permanganometría.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE ÓXIDO DE ZINC FUNCIONALIZADAS CON CURCUMINA

Juan D. Chamorro-Cañón a, Cristian C. Villa a, Jorge A. Gutiérrez b*.

^a Programa de Química. Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías. Universidad del Quindío. Cra ¹⁵ Calle ¹² N. Armenia. Quindío.

^b Programa de Seguridad y Salud en el Trabajo. Facultad de Ciencias de la Salud. Universidad del Quindío. Cra ¹⁵ Calle 12 N. Armenia. Ouindío.

* Autor de correspondencia: jgutierrez@uniquindio.edu.co

Palabras Claves: Nanopartículas; semiconductores, curcumina.

El Óxido de Zinc es un semiconductor versátil usado en numerosas aplicaciones, en los últimos años ha sido utilizado en la síntesis de nanopartículas (NPs) que presentan no solo características semiconductoras sino propiedades antimicrobianas y de absorción de luz en la región ultravioleta. Una de las aplicaciones más interesantes de las ZnO NPs es en el desarrollo de celdas solares, sin embargo, al solo absorber luz en el ultravioleta el rendimiento de las mismas es limitado. Es por esto que en este trabajo se propone la funcionalización de las NPs con Curcumina, una molécula con amplia banda de absorción en la región azul del espectro que mejoraría la eficiencia energética. En este trabajo se caracterizaron a través de diferentes técnicas las NPs y la Curcumina, y se determinó cómo el complejo formado afecta las propiedades del sistema. Las NPs se prepararon partiendo de Actetato de Zinc Dihidratado e Hidróxido de Sodio en una reacción hidrotermal de co-precipitación, la temperatura y agitación se mantuvieron constantes durante el tiempo de reacción; la funcionalización de las nanopartículas con Curcumina se realizó partiendo de estos reactivos diluidos en una solución etanólica, con Trietilamina como agente complejante, bajo un sistema de reflujo con agitación y temperatura constante. Las propiedades de las nanopartículas, la Curcumina y el complejo funcionalizado se determinaron usando difracción de rayos X (DRX), espectrofotometría Uv-Vis y fotoluminiscencia (PL). Se observó en el espectro del DRX, que en la síntesis se obtuvo únicamente ZnO, al formar el complejo Cur-ZnO Nps la capacidad de absorción de luz del sistema se amplía hasta 500 nm, y la emisión en PL aumenta de igual manera.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN ELECTROQUÍMICA DE ELECTRODOS DE CARBÓN VÍTREO MODIFICADOS CON ÓXIDO DE GRAFENO Y NANOPARTÍCULAS DE ORO

Romina V. Valenti a*, Eduart A. Gutiérrez-Pineda a, María J. Rodríguez Presa a, Claudio A. Gervasi a.

^a Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas, Teóricas y Aplicadas – INIFTA, CONICET,

Argentina.

^bEscuela de Química, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia, ⁶⁸⁰⁰⁰² * Autor de correspondencia: romi.valenti@gmail.com

Palabras Claves: Electrodos modificados; óxido de grafeno; nanopartículas; síntesis electroquímica.

Los materiales carbonosos se han utilizado extensamente como materiales de electrodo debido a sus propiedades conductoras, y procesos de fabricación relativamente simples y económicos. El grafeno y sus derivados no constituyen una excepción, presentando interesantes propiedades electroquímicas. El óxido de grafeno (GO) puede obtenerse por diversos métodos. Entre ellos se destaca la exfoliación electroquímica ya que es una forma sencilla, rápida y adecuada desde el punto de vista ambiental. El GO puede reducirse electroquímicamente, obteniéndose óxido de grafeno reducido (ERGO). Ambos materiales se han utilizado para la fabricación de sensores electroquímicos. Otro excelente material para el desarrollo de sensores son las nanopartículas de oro (AuNPs) por sus destacadas propiedades ópticas, químicas y eléctricas, como alta eficiencia catalítica, gran conductividad eléctrica, elevada relación área-volumen y buena biocompatibilidad. Así, nanocompuestos constituidos por dos o más de estos elementos son de gran interés debido a los efectos sinérgicos y adecuadas propiedades para diversas aplicaciones. En este trabajo se propone la modificación de electrodos de carbón vítreo con óxido de grafeno sintetizado electroquímicamente, utilizando la técnica de "drop coating" (empleando suspensiones acuosas de GO) y, sobre el mismo, la síntesis electroquímica de nanopartículas de oro a partir de la aplicación de un doble escalón de potencial en una solución de HAuCl₄. El material obtenido fue caracterizado por SEM, UV-Vis, FTIR, y XPS. Para evaluar la actividad electroquímica de los electrodos modificados se utilizó la cupla ferrocianuro-ferricianuro como par redox testigo y las técnicas de voltamperometría cíclica y espectroscopía de impedancia electroquímica. Los electrodos modificados mostraron actividad catalítica, con lo que se espera emplearlos exitosamente en aplicaciones analíticas. Además, podrán modificarse mediante reducción electroquímica de GO aumentando su rango de aplicación hacia diferentes analitos.



CUANTIFICACIÓN DE ACETALDEHÍDO CON UN BIOSENSOR FABRICADO CON NANOTUBOS DE CARBONO Y TIONINA

Lucia Berasategui ^{a*}, Fausto N. Comba ^b, Ana M. Baruzzi ^a.

^a Instituto Nacional de Investigaciones en Físico Química de Córdoba, CONICET. Departamento de Fisicoquímica,
Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina.
^b Centro de Investigación y Transferencia de Villa María, CONICET. Departamento de Ingeniería Química, Universidad
Tecnológica Nacional, Facultad Regional Villa María, Córdoba, Argentina.
* Autor de correspondencia: luciaberasategui89@gmail.com.ar

Palabras Claves: Biosensor; acetaldehído; enzima; nanotubos de carbono; tionina.

El acetaldehído es un compuesto altamente carcinógeno al que los humanos están expuestos regularmente a partir de múltiples fuentes, principalmente bebidas alcohólicas y cigarrillo. Es clasificado como carcinógeno humano del Grupo 1. La metodología más utilizada para su cuantificación es la cromatografía gaseosa. La principal complicación en estos estudios es su elevada volatilidad. Por esto, es importante el desarrollo de métodos que permitan la detección y cuantificación in situ. El empleo de biosensores constituye una herramienta útil y rápida para su medición. En este trabajo, se desarrolló un biosensor enzimático, basado en la inmovilización de la enzima aldehído deshidrogenasa (AldDH) en una matriz proteica. Cuando esta enzima se encuentra en presencia de acetaldehído, ocurre una reacción redox en la cual el acetaldehído se oxida a ácido acético y el cofactor de la enzima (NAD+) se reduce a NADH, siendo su concentración proporcional a la de acetaldehído.

Para biosensar NADH, se realizó una plataforma sobre un electrodo de carbono vítreo, compuesta por nanotubos de carbono, mucina y tionina que actúa como mediador redox, permitiendo detectar NADH a bajos potenciales. Por encima de ésta, se preparó un biosensor tipo sándwich, en el que se incorporó una matriz proteica compuesta por AldDH entrecruzada con glutaraldehído e incluyéndola entre dos membranas de policarbonato sujetadas por un capuchón plástico. Una vez logradas las condiciones óptimas, se estudió el funcionamiento del biosensor, evaluando la relación entre la sensibilidad, estabilidad e intervalo de linealidad en función de la composición, grado de entrecruzamiento de la matriz, pH y fuerza iónica. El potencial seleccionado fue 0,1 V, y el pH de trabajo 8,0. Se obtuvo un buen intervalo de linealidad, con una sensibilidad igual a 3,0 μA/mM, límite de detección de 7μM, excelente reproducibilidad y la respuesta biolectroquímica es mantenida al 80% de aproximadamente un mes (estabilidad).

Se desarrolló un biosensor económico, de sencilla fabricación y con una performance analítica aceptable respecto a la metodología tradicional empleada en la cuantificación de acetaldehído en diversas muestras como bebidas alcohólica y saliva:

INFLUENCIA DE LOS PRINCIPALES PARÁMETROS DE DEPOSICIÓN ELECTROFORÉTICA SOBRE EL ESPESOR TEÓRICO DE RECUBRIMIENTOS DE AL,O, SOBRE BARRAS DE GRAFITO

Michael J. Grimaldos a, Viviana R. Güiza a, Sergio I. Blanco a*.

^a Escuela de Ingeniería Metalúrgica y Ciencia de Materiales, Universidad Industrial de Santander, Colombia. * Autor de correspondencia: siblanco@uis.edu.co

Palabras Claves: Deposición electroforética; alúmina; recubrimientos; nanomateriales.

Los recubrimientos cerámicos son de gran importancia en la actualidad debido a que ofrecen la posibilidad de mejorar propiedades tribológicas y químicas del sustrato recubierto. Estos recubrimientos pueden obtenerse mediante CVD, PVD, sol-gel, o deposición electroforética (EPD), entre otros. La EPD se destaca por ser una técnica económica, efectiva y de alta reproducibilidad, la cual consta de dos etapas. Primero, se produce la migración de partículas suspendidas en solución al aplicarse un campo eléctrico entre dos electrodos sumergidos en ésta. En la segunda etapa, las partículas son depositadas sobre el sustrato, formando una película o recubrimiento. En el presente trabajo, se estudió la influencia de factores experimentales como: tiempo de deposición, voltaje aplicado, concentración de la solución y geometría del sustrato, sobre la migración de partículas de Al₂O₃ suspendidas en una solución de etanol:agua (90:10). A partir de la medición de la carga superficial de las partículas, se determinó la variación de voltaje a aplicar. Posteriormente, con base en estudios previos reportados en la literatura, se procedió a realizar un modelo matemático que permitiera predecir algunas características del recubrimiento a fabricar. Se logró determinar la movilidad electroforética a partir de condiciones experimentales de trabajo, así como también la masa total depositada del recubrimiento en cualquier instante del ensayo en función del volumen y la concentración de partículas en la solución. Finalmente, se logró establecer la porosidad del recubrimiento obtenido en función de la masa depositada y el espesor del recubrimiento. Estos resultados teóricos fueron comprobados experimentalmente mediante cronoamperometrías y microscopía confocal, permitiendo validar el modelo matemático desarrollado.



DETERMINACIÓN VOLTAMPEROMÉTRICA DE GLUCOSA EN CAFÉ PERGAMINO HÚMEDO COMO PARÁMETRO DE CALIDAD

Diomer H. Aristizabal a*, César A. Muñoz a, Valeria Restrepo a, Johan S. Vélez a, Santiago García a, Isabel C. Pérez a,

Frank A. Cuesta a, Gerardo A. Vargas b*.

^a Centro para la Formación Cafetera C.F.C, Servicio Nacional de Aprendizaje SENA- Regional Caldas, Colombia ^b Desarrollo Social, Cooperativa de Caficultores de Manizales, Colombia Autor de correspondencia: dhernab@sena.edu.co

Palabras Claves: Electroquímica física; fermentación; caficultura; beneficiado.

En la actualidad, el café pergamino húmedo (CPH) se comercializa en un 30% de las plantaciones del país. Este producto resulta después del beneficiado del fruto y antes del secado. La comercialización y distribución es inadecuada, ya que genera problemas en la calidad del café, afectando sus propiedades sensoriales. El CPH recibido en los centros de acopio, carece de análisis rápidos. Aquí, es imperceptible cualquier alteración aparente para la comercialización y solo son detectados al momento de realizar la prueba de calidad en taza, posterior al proceso de compra. Por lo tanto, es importante diseñar y ejecutar una medida de calidad del café en los centros de acopio, con el fin de controlar la problemática que involucra el mercado a nivel nacional e internacional. Para tal fin, se estudió el amargor, el cual es uno de los parámetros esenciales en los paneles de catación y que están ampliamente relacionados con el deterioro del café. Este parámetro se realizó basándose en evaluaciones sensoriales descriptivas cuantitativas, donde se utilizó la escala de 9 puntos, desarrollada en Cenicafé para la calificación organoléptica del café. En este sentido, se determinaron los niveles de esta variable mediante un modelo de superficie de respuesta, utilizando un experimento que proporcionó valores razonables. A continuación, se estableció el modelo matemático que mejor se ajustó a los datos obtenidos con el objetivo de asignar los valores de los factores de tiempo, pH y concentración de glucosa para optimizar el valor del amargor de la bebida. Debido a que los primeros procesos de fermentación, ocurridos en el grano, están relacionados con la fermentación de los carbohidratos, se monitoreó la concentración de glucosa presente en el fruto, a través de técnicas electroquímicas, en función del tiempo y paralelo al pH. De acuerdo con resultados parciales de la investigación y literatura, los niveles de glucosa aumentan por la presencia de sacarosa en el fruto maduro y debido a los procesos de fermentación, es trasformada en azúcares reductores como glucosa y fructosa, gracias a bacterias y hongos, que favorecen los procesos fermentativos del café.

ESTABILIDAD ELECTROQUÍMICA DE RECUBRIMIENTOS COMPUESTOS POR NANOPARTÍCULAS DE QUITOSANO SOBRE TITANIO OBTENIDOS MEDIANTE DEPOSICIÓN ELECTROFORÉTICA

Dayanna A. Rojas a*, Lady M. Quintero a, Sergio I. Blanco a, Claudia C. Ortiz a, Jorge A. Gutiérrez b.

^a Grupo de Investigación en Bioquímica y Microbiología (GIBIM), Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Santander, Colombia.

b Universidad del Quindío, Armenia, Quindío, Colombia.
* Autor de correspondencia: dayannarojas9@gmail.com

Palabras Claves: Deposición electroforética; nanopartículas; quitosano; recubrimientos.

Estadísticas de la Organización Mundial de la Salud, calculan que en promedio un 28.7% de los pacientes a los cuales se les ha realizado una cirugía de inserción de implante ha desarrollado infecciones. Una de las consecuencias más comunes después de una cirugía que involucre implantes es la infección que suele producirse en el quirófano o en el postoperatorio, el 60% de las infecciones son causadas por *estafilococos*, que puede llevar a procedimientos médicos prolongados, falla general del implante y posteriormente el requisito para la operación auxiliar para su exclusión, aumentando los gastos directos e indirectos y las tasas de mortalidad y morbilidad.

Para afrontar esta problemática se han realizado gran cantidad de estudios enfocados en el desarrollo de materiales biocompatibles y que reduzcan la problemática del contagio de infecciones. En el presente estudio, se pretende mejorar sus propiedades añadiendo moléculas funcionales como las nanoparticulas de Quitosano, el Quitosano es un polisacárido proveniente de la reacción de desacetilación de la quitina extraída en la caparazón de los crustáceos. Este polisacárido es utilizado en la medicina farmacológica y como agente cicatrizante esto por sus cualidades pro-coagulantes al igual que su baja toxicidad y propiedades antimicrobianas evitando el contagio de infecciones y rechazo al implante. En este trabajo se obtuvieron nanopartículas de Quitosano por técnica de gelificación previamente realizadas en el laboratorio las cuales se depositan electroforética a láminas de titanio de alta pureza, cambiando condiciones y parámetros de voltaje de (12, 15, 20 y 25) V y tiempo de (5, 10 y 15) minutos. Observando que a un potencial de 15V y un tiempo de 15 minutos se obtiene un recubrimiento más homogéneo.

Se realiza caracterización por análisis de espectroscopia de infrarrojo con transformada de Fourier (FTIR) y microscopia electrónica de barrido (SEM, por sus siglas en inglés) a las nanopartículas de Quitosano y los recubrimientos en las láminas de titanio. La estabilidad electroquímica de las láminas recubiertas se evaluó mediante Espectroscopía de impedancia electroquímica, utilizando PBS como medio electrolítico. Los resultados obtenidos mostraron una variación en la resistencia de transferencia de carga en comparación con las láminas desnudas.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE QUITO-SANO, QUITOSANO-PLGA, QUITOSANO-PEI

Lady M. Quintero a*, Dayanna A. Rojas a, Claudia C. Ortiz a, Sergio Blanco a,b, Jorge A Gutiérrez c.
a Grupo de Investigación en Bioquímica y Microbiología (GIBIM), Escuela de Química, Universidad Industrial de
Santander, Bucaramanga, Santander, Colombia.
b Escuela de Metalúrgica, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Santander, Colombia.,

c Facultad de Ciencias de la Salud, Universidad del Quindío, Armenia, Quindío, Colombia.
*Autor de correspondencia: Imquinterop@hotmail.com

Palabras clave: Biomateriales; quitosano; nanoestructuras; recubrimientos.

Los biomateriales se implantan con el objeto de remplazar y/o restaurar tejidos vivientes y sus funciones, lo que implica que están expuestos de modo temporal o permanente a fluidos corporales. Los biomateriales deben cumplir con las condiciones de partida, como ser biocompatibles y asegurar una determinada vida media. En este sentido, basados en las interacciones moleculares que presentan las biomoléculas en diferentes medios, resulta interesante formar nanoestructuras compuestas para ser depositadas en la superficie de los materiales que conforman la estructura de los implantes, y de esta manera obtener recubrimientos biocompatibles con el cuerpo humano. El Quitosano es un polisacárido que proviene de la quitina por medio de una reacción de desacetilación. Se ha descrito como un polímero catiónico lineal, biodegradable, de alto peso molecular y ambientalmente amigable al ser extraído de la naturaleza. Asimismo, es importante la funcionalidad que le pueden dar moléculas poliméricas como Poli(ácido láctico-co-glicólico) (PLGA), Polilisina (PLL), Polietilenimina (PEI) y Poliornitina (PLO), ya que estudios previamente realizados han demostrado que estas moléculas son útiles en el campo de la regeneración de tejidos, al poseer propiedades de baja toxicidad, buena adherencia celular y características antimicrobianas. El objetivo de este trabajo fue sintetizar nanoestructuras de Quitosano funcionalizadas con polímeros como Poli(ácido láctico-co-glicólico) (PLGA), Polietilenimina (PEI), para su posterior deposición electroforética y estudio en el efecto antimicrobiano de superficies de titanio. Las nanoestructuras de Quitosano fueron sintetizadas mediante la técnica de gélificación iónica, formando soluciones de Quitosano 0,5% (p/v) disuelto en Acido Acetico al 1% (v/v) y añadiendo un 1 mL de una solución acuosa de tripolifosfato (0.25%, p / v) a 3 mL de solución de Ouitosano. Luego se añadió una cantidad predeterminada 5 mg/mL de PLGA, PEI a la solución de nanoestructuras Quitosano. Los sistemas se caracterizaron por espectroscopia de infrarrojo con transformada de Fourier (FTIR), Dispersión de luz dinámica (DLS) y microscopia electrónica de barrido (SEM, por sus siglas en ingles). Con los resultados se pudo comprobar que las partículas sintetizadas se encontraban enlazadas esto se observó en el análisis (FTIR), en el análisis de DLS se observaron tamaños del rango de los 100 a los 300 nanómetros.





SÍNTESIS TRICOMPONENTE DE NUEVOS ESPIROOXINDOLES

Pablo E. Romo a*, Braulio Insuasty a, Rodrigo Abonia a, Jairo Quiroga a.

a Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos, Departamento de Química, Universidad del Valle, Colombia.

* Autor de correspondencia: pablo.e.romo@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Espirooxindoles; reacción 1,3-dipolar.

Los espirooxindoles son alcaloides derivados del indol que se encuentran ampliamente en la naturaleza donde se destacan la Elacomina, la Horsfilina, Rincofilina, Espirotriprostatin A y B. Los espirooxindoles presentan una amplia gama de actividades biológicas ya que actúan como agentes antitumorales, antibacteriales, antifúngicos, sedativos, anticonceptivos y antioxidantes; por eso es de vital importancia el diseño y la síntesis de nuevos compuestos que incluyan dicho fragmento en su estructura. Las reacciones de cicloadición 1,3-dipolares dada su versatilidad permiten obtener moléculas con un alto grado de complejidad en un solo paso y se presentan como una ruta importante en la síntesis de espirooxindoles a partir de la isatina, aminoácidos y olefinas.

En este trabajo de investigación se llevó a cabo la síntesis tricomponente de nuevas espiro[indolina-3,3'-indolizinas]. Para ello se realizó la reacción tricomponente entre isatinas sustituidas (1), el ácido pipecólico (2) y el ácido 3-benzoilacrílico (3) como dipolarófilo en acetonitrilo bajo calentamiento a reflujo. La reacción presentó rendimientos entre el 45-69 %. La caracterización estructural se llevó a cabo usando técnicas espectroscópicas: IR, RMN (¹H, ¹³C, DEPT-135, HSQC, HMBC) y espectrometría de masas.

Esquema 1

USO DE LA CICLOADICIÓN AZIDA-ALQUINO CATALIZADA POR COBRE (QUÍMICA CLICK) EN LA OBTENCIÓN DE UN PÉPTIDO OUIMÉRICO ANTIBACTERIANO DERIVADO DE LA LACTOFERRICINA BOVINA Y LA BUFORINA II

Hector M. Pineda a*, Javier E. García b, Zuly J. Rivera a.

^a Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C ^b Departamento de Farmacia, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C * Autor de correspondencia: hmpinedac@unal.edu.co

Palabras Claves: PAMs; lactoferricina bovina; buforina; quimera peptídica; CuACC; puente triazol

El uso indiscriminado de antibióticos ha generado un incremento de la resistencia de las bacterias, en recientes reportes emitidos por la Organización Mundial de la Salud (OMS) se describe la importancia de la búsqueda de moléculas que logren contrarrestar esta problemática, la cual es considerada como una amenaza creciente para la salud a nivel mundial. Dentro de este contexto, se presenta un nuevo reto para el campo de la salud: la búsqueda de nuevas moléculas con potencial terapéutico que logren combatir infecciones causadas por cepas resistentes y que su actividad se base en mecanismos de acción diferentes a los que exhiben los antibióticos convencionales. La Buforina II (BFII) y la Lactoferricina Bovina (LfcinB) son péptidos antimicrobianos (PAMs) de origen animal. Estos dos PAMs han presentado potente actividad antibacteriana contra cepas Gram negativas y Gram positivas. En el actual estudio, se diseñó un péptido quimérico derivado de la LfcinB y BFII, el cual contiene las secuencias de los motivos mínimos antibacterianos reportados para los dos PAMs, específicamente, LfcinB (20-25): RRWQWR y BFII (32-35): RLLR. La quimera fue sintetizada mediante la reacción de ciclo adición intramolecular con un puente de triazol entre un grupo azida y un grupo alquino (CuACC). La quimera mostró una actividad antibacteriana más alta contra E. coli ATCC 25922 y S. aureus ATCC 25923 que las secuencias originales. Además, el péptido quimérico no mostró un efecto hemolítico significativo.



RASTREO EXPLORATORIO DE LA FLEXIBILIDAD QUÍMICA ENDÓGENA VEGETAL MEDIANTE METABOTIPIFICACIÓN POR LC-MS: UN ENFOQUE QUIMIOPROSPECTIVO

Luisa Orduz-Diaz a, Ericsson Coy-Barrera a*.

^a Laboratorio de Química Bioorgánica, Universidad Militar Nueva Granada, Cajicá-Cundinamarca, Colombia.

*Autor de correspondencia: ericsson.coy@unimilitar.edu.co

Palabras Claves: LC-MS; fenotipificación; metabolómica; perfilado metabólico; quimioprospección.

A pesar del claro reconocimiento sobre el hecho de que la biodiversidad neotropical vegetal se constituye en una fuente colosal para iniciativas de quimioprospección, la falta de estudios sobre aquellos cambios relacionados con la (eco)fisiología de las plantas, se constituye en una limitación para tales fines. Por tanto, es requerido con prontitud investigaciones que permitan observar/analizar/interpretar estos cambios en plantas no modelo. Las plantas poseen sus rutas metabólicas propias (comúnmente restringidas a determinados grupos taxonómicos) que guían miles de metabolitos secundarios para reaccionar con éxito a condiciones de estrés causadas por factores bióticos/abióticos, las cuáles juegan un papel importante en la interacción con el entorno, y que son controladas bajo un equilibrio entre el metabolismo constitutivo e inducido. Para garantizar la mejor interpretación de tal información biológica/química multidiversa, a gran escala, la metabolómica (a través de perfilado metabólico y análisis dirigido) surge como una poderosa herramienta para examinar los cambios de expresión fenotípica basada en el metabolismo secundario. Al ser una de las últimas adiciones a la forma de pensamiento de las 'ómicas', la metabolómica ofrece una caracterización del conjunto de metabolitos en un sistema biológico dado desde un punto de vista holístico. Este enfoque se utiliza ampliamente para explorar la respuesta dinámica de los sistemas vivos con el fin de obtener una gran cantidad de información acerca de la plasticidad/versatilidad del metabolismo secundario, la cual ha sido ampliamente explorada/utilizada en nuestro grupo para propósitos de fenotipificación de organismos vegetales nativos y/o exóticos. En este contexto, el presente trabajo expone una serie de ejemplos llevados a cabo con éxito. Así, a través de diferentes perspectivas basadas en proceso dirigido y/o no-dirigido, bajo análisis supervisado y no-supervisado, se evaluaron/discriminaron/diferenciaron plantas según sus perfiles de metabolitos especializados en condiciones estrictamente conocidas. Así, aquellos estudios relacionados sobre plantas invasoras y no-invasoras para la localización de moléculas plantilla y aquellas que median interacción con herbívoros, respuestas de los parámetros de control de calidad para alimentos funcionales, determinación de marcadores metabólicos y diferenciación ontogénica para diferentes aplicaciones, son los ejemplos que permitieron evidenciar el proceso adecuado de rastreo de la versatilidad metabólica de algunas plantas con potencial utilidad para distintos propósitos.

AISLAMIENTO DE MICROORGANISMOS TERMÓFILOS PRODUCTORES DE ENZIMAS DE IMPORTANCIA AGROINDUSTRIAL

Cristian A. Rodríguez a*, Juan D. Silva a, María J. Hurtado a, Adrián D. Betancur a.

a Tecnoacademia Manizales Centro de Automatización Industrial, SENA Regional Caldas, Colombia. * Autor de correspondencia: carodriguez880@misena.edu.co

Palabras Claves: Microorganismos termófilos; enzimas; catálisis; agroindustria.

El uso de catalizadores químicos es común en los procesos industriales, sin embargo son costosos y en la mayoría de los casos no biodegradables, esto ha hecho que la comunidad científica se replantee la necesidad de utilizar sustancias orgánicas como las enzimas para favorecer diversos procesos de conversión a nivel industrial, no obstante las enzimas tienen una limitada capacidad debido a la diversidad de variables como pH, temperatura y especificidad de sustrato que se deben controlar, de manera que no se desnaturalicen y puedan funcionar de forma óptima. En este proyecto se aislarán microorganismos termófilos para determinar la presencia de enzimas que puedan tener un uso potencial en la agroindustria, esto permitirá posteriormente formular bioinsumos de base microbiana que permitan catalizar procesos industriales aprovechando las condiciones extremas que pueden resistir las enzimas de microorganismos extremófilos. Los microorganismos serán aislados de fuentes termales de la región, se empleara un medio en g/L compuesto por KCl 0.2, NaCl 5.0, CaCl, 0.1, MgSO 0.5, NaHCO, 0.2, Bacto-triptona 5.0, Bacto-peptona 5.0, Extracto de levadura 2.0, posteriormente se incubaran a 55 °C por 7 días, los microorganismos aislados serán criopreservados con glicerol al 15% y caldo nutritivo a -80°C, posteriormente se evaluará cualitativamente la producción de enzimas como celulasas, amilasas, proteasas y lipasas mediante siembra y visualización de halos de solubilización alrededor de las colonias microbianas, para ello se empleara medios con el respectivo sustrato, así: CMC, Almidón soluble, Skin milk y aceite vegetal, para celulasas, amilasas, proteasas y lipasas respectivamente. La identificación de los microrganismos aislados se realizará mediante secuenciación del gen ADNr 16S, sumado a ello los genomas de los microorganismos que presenten el mayor potencial para la producción de enzimas de importancia agroindustrial se secuenciaran empleando la metodología Ilumina, y mediante herramientas bioinformáticas de licencia libre se ensamblaran, seguidamente se hará la anotación del genoma en busca de determinar conjuntos de genes que codifiquen para enzimas de importancia en la agroindustria, esto con el fin de generar información para futuros proyectos en los que se pueda plantear la obtención de proteínas termófilas recombinantes expresadas en microorganismos de fácil crecimiento.



FINDING THE HIDING TREASURE ON SUGARCANE: LIGNIN

Andrea Salgado a, Ángela S. Viteri a, Carlos A. Álvarez a*.

^a Departamento de Ingeniería Bioquímica, Universidad ICESI, Colombia * Autor de correspondencia: <u>caalvarez@icesi.edu.co</u>

Palabras Claves: Bagasse; lignin solubilization; deep eutectic solvents; depolymerisation; biomass fractionation.

Colombia has a vast plantation of sugar cane and one of the highest sugar productivities of the world (Ton per hectare) what causes an annual production of more than 6.5 million tons of bagasse on the region. Sugar cane bagasse is approximately composed of 45,3 % cellulose, 27,5% hemicellulose and 23,6% lignin. However, lignin solubilization and extraction has been recognized by the scientific community as the main limitation for its efficient conversion. Existing methods cannot recover a large quantity of high-purity lignin without alterations in its chemical structure.

This study reports a new method to extract and dissolve lignin from sugar cane bagasse produced in Valle del Cauca-Colombia region using a set of in-house synthesized Deep Eutectic Solvents (DES). The DES is a mixture of two or more chemicals acting as either hydrogen-bond donors (HBD) or hydrogen-bond acceptors (HBA), and it has been recently reported as a potential solvent for lignin extraction. We design the DESs to use only renewable materials that can be obtain from biomass. The resulting DES lignin has unique structural features with high potential towards a biocatalytic conversion approach. The efficient extraction of lignin and the increase of its reactivity towards biological conversion is due to the exposition of the new active sites for conversion, as lignin conformational changes from a rigid structure to a relaxed conformation during solubilization.

This study presents an opportunity to find a set of suitable conditions to facilitate extraction and solubilization of high purity lignin from sugar cane bagasse with high purity and minimal chemical modifications, which will help establish breakthrough pathways in lignin valorization research using a potential green solvent.

EVALUACIÓN DE LOS PERFILES CROMATOGRÁFICOS DE FITOTE-RAPÉUTICOS A BASE DE ALCACHOFA (CINARA SCOLYMUS) Y CA-LÉNDULA (CALÉNDULA OFFICINALIS)

Angélica M. Santamaría a, Laura G. Rojas a, William F. Castrillón b, Geison M. Costa a*.

^a Grupo de Investigación Fitoquímica Universidad Javeriana (GIFUJ), Pontificia Universidad Javeriana, Colombia ^b Grupo de Investigación Fitoquímica Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Colombia. * Autor de correspondencia: modesticosta.g@javeriana.edu.co

Palabras Claves: Fitoterapéuticos; caléndula; alcachofa; control de calidad; cromatografía.

Entre los principales fitoterapéuticos comercializados en Colombia se encuentran productos a base de caléndula y alcachofa. Uno de los desafíos en la industria de fitoterapéuticos es el control de calidad de los productos acabados, específicamente en relación a la composición química de los extractos. En este sentido, cambios en los perfiles químicos pueden indicar variabilidad del material vegetal, fallas en el proceso de producción, o aun, de manera más grave, adulteraciones y/o falsificaciones. El objetivo de este trabajo fue comparar los perfiles cromatográficos por TLC y UPLC de fitoterapéuticos a base de alcachofa y caléndula adquiridos en la ciudad de Bogotá. Se adquirieron 24 productos fitoterapéuticos a base de Caléndula oficinales y 26 Cinara scolymus, en las 16 localidades de Bogotá. Una vez hecha la clasificación y codificación de cada uno, se procedió a un estudio del tipo doble-ciego. La extracción fue por ultrasonido, con 5g del contenido de las capsulas y/o comprimidos pulverizados en 25mL de metanol durante 30min a 40°C. Los extractos fueron concentrados en rotaevaporador. Los análisis se realizaron por TLC y UPLC, en fase normal y fase reversa, respectivamente, usando los marcadores descritos en la literatura oficial para estas plantas, y con una fase móvil que permitió un análisis adecuado de los extractos y de sus marcadores. Los análisis permitieron observar la presencia y/o ausencia de los marcadores ácido clorogénico, ácido cafeico y rutina para caléndula y cinarina, ácido clorogénico, ácido cafeico y rutina para alcachofa, en donde 19 de las muestras de caléndula dieron positivo en la identificación de los marcadores de esta planta, mientras que para 7 no se logró observar uno o más de estos marcadores. Para alcachofa, 18 de las muestras presentaron los marcadores de esta especie y 8 denotan perfiles diferentes y/o la ausencia de los marcadores evaluados. Adicionalmente, algunos fitoterapéuticos, tanto a base de caléndula como de alcachofa, presentaran perfiles cromatograficos muy distintos entre sí y/o la ausencia de marcadores específicos. Para estos, se seguirán realizando nuevos estudios químicos y estadísticos que permitan evaluar si cumplen o no con la normativa colombiana.



SÍNTESIS Y ESTUDIOS ELECTRÓNICOS DE NUEVOS PIGMENTOS ORGÁNICOS BASADOS EN BODIPY Y TRIARILAMINAS PARA SU APLICACIÓN EN CELDAS SOLARES SENSIBILIZADAS POR PIGMENTOS

Carlos A. Gómez a*, Alejandro Ortiz a,b.

^a Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos, Universidad del Valle, Colombia. ^b Center for Research and Innovation in Bioinformatics and Photonics-CIBioFi, Calle ¹³ No. ¹⁰⁰–⁰⁰, Edificio ³²⁰, No. ¹⁰⁶⁹, Cali, Colombia

* Autor de correspondencia: <u>carlos.gomez.r@correounivalle.edu.co</u>

Palabras Claves: DSSC; colorantes; sistemas D- π -A; BODIPY; triarilaminas; dicianorodanina.

Se sintetizaron nuevos colorantes orgánicos del tipo dador-puente π -aceptor basados en el núcleo de BODIPY con triarilaminas p-sustituidas en las posiciones C-2 y C-6 actuando como grupos donadores y con grupos del tipo ácido cianoacrílico, ácido benzóico y dicianorodanina enlazados al C-8 como electro-aceptores (Figura 1), los colorantes obtenidos se caracterizaron mediante las técnicas de RMN mono y bidimensional así como espectrometría de masas.

Se realizarán estudios fotoquímicos mediante espectroscopía UV-Vis y electroquímicos mediante voltamperometría cíclica y de onda cuadrada para comprender los fenómenos de transferencia de carga de estos colorantes y calcular los valores experimentales del HOMO y LUMO, los estudios computacionales mediante DFT permitirán conocer la topología de los orbitales frontera, finalmente se evaluará la viabilidad de los nuevos colorantes para su uso en celdas solares sensibilizadas por pigmentos.

Figura 1. Nuevos colorantes derivados de BODIPY propuestos.

SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN, ENSAYOS DE SOLUBILIDAD Y VELOCIDAD DE DISOLUCIÓN DE SALES DE NAFAZOLINA PARA MEJORAR SU BIODISPONIBILIDAD

Elder Díaz a*, Cristian Rojas a, Robert A. Toro a, José A. Henao a.

^a Grupo de Investigación en Química Estructural (GIQUE), Escuela de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Industrial de Santander, A.A. ⁶⁷⁸, Ciudadela Universitaria, Bucaramanga, Santander, Colombia.

* Autor de correspondencia: elderuis 174@gmail.com.

Palabras Claves: Nafazolina; estructura cristalina; sales; solubilidad; velocidad de disolución.

La baja solubilidad es el principal problema en la industria farmacéutica de muchos medicamentos porque las propiedades farmacocinéticas y farmacodinámicas deficientes limitan la biodisponibilidad. La mejora de la velocidad de disolución y la solubilidad mediante la modificación supramolecular de una API es una estrategia de ingeniería cristalina [1]. La base libre de este API (Fig.1) es insoluble en medio acuoso y sufre degradación en condiciones ambientales, motivo por el cual se comercializa en forma de sal de cloruro o nitrato. Con la finalidad de obtener nuevos materiales de este API, se sintetizaron sales de nafazolina con sustancias comúnmente usadas en la industria farmacéutica. La síntesis se realizó mediante la técnica de mecanoquímica asistida por solvente (Molienda asistida por líquido, por sus siglas en ingles LAG). La caracterización y ensayos de solubilidad de los productos obtenidos se llevaron a cabo mediante métodos espectroscópicos, térmicos y difractométricos.



Figura 1. Unidad asimétrica de la nafazolina.

[1]. Heidelberg, S.-V. (Ed.). (2000). Supramolecular Chemistry Fundamentals and Applications (Springer). japanese.



PREPARATION AND CRYSTALLOGRAPHIC CHARACTERIZATION OF NAPHAZOLINE SUCCINATE

Elder Díaz a*, Robert A. Toro a, José A. Henao a.

^a Grupo de Investigación en Química Estructural (GIQUE), Escuela de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Industrial de Santander, A.A. ⁶⁷⁸, Ciudadela Universitaria, Bucaramanga, Santander, Colombia * Corresponding author: elderuis174@gmail.com

Keywords: Naphazoline; crystalline structure; salts.

The synthesis of multicomponent crystal, in the pharmaceutical industry, it has become a tool to improve some physicochemical properties, of active principle (API from its acronym in English). The naphazoline is an antihistamine used for relieving the symptoms of allergies caused by histamine (aminoetilimidazole β) [1]. The free base of this API is insoluble in aqueous medium and undergoes degradation under environmental conditions, the reason why it is marketed in the form of a chloride or nitrate salt. In order to obtain new materials from this API, naphazoline salts were synthesized with substances commonly used in the pharmaceutical industry such as succinic acid. The synthesis was carried out by common techniques used in the elaboration of crystals such as solvent-assisted mechanochemistry. The characterization of the products obtained was carried out by spectroscopic, thermal and diffractometric methods.

[1]. Nanjwade, V. K. New Trends in the Co-crystallization of Active Pharmaceutical Ingredients. Mirmehrabi, M., Rohani, S., Jennings, M. C. (2005). Stavudine. Acta Crystallogr. Sect. C Cryst. Struct. Commun. 61(12), o695-o698. doi10.1107/S0108270105034591 Batisai, E., Smith, V. J., Bourne, S. a., Báthori, N. B. (2015). Solid s 01, 1–5 (2011).

ESTUDIO POLIMÓRFICO DE LA TRIMEBUTINA MALEATO OBTENIDO A DIFERENTES CONDICIONES DE CRISTALIZACIÓN

Katherin V. Serrano^a, Robert A. Toro^b, José A. Henao^{c*}.

a Grupo de Investigación en Ouímica Estructural, Universidad Industrial de Santander, Colombia * Autor de correspondencia:: jahenao@uis.edu.co

Palabras Claves: Trimebutina maleato; polimorfismo; cristalización; difracción de rayos X.

El polimorfismo es la capacidad que tiene una molécula de cristalizar en diferentes conformaciones o estructuras en el estado sólido. El estudio de este fenómeno es de gran interés en la industria farmacéutica, ya que puede afectar las propiedades de un ingrediente farmacéuticamente activo (IFA) tales como solubilidad, estabilidad y biodisponibilidad entre otros. En el caso de los productos farmacéuticos, es común que se obtengan materiales polimorfos al someter este tipo de materiales variando las condiciones de cristalización, esto es, usando diferentes sistemas de solventes, cambios de temperatura, molienda, compresión, humedad y agitación entre otros. De igual manera, pueden ocurrir transiciones en el estado sólido entre polimorfos. En estas transiciones, un polimorfo puede transformarse en otro que sea más estable termodinámicamente en un rango de temperatura, humedad y presión específica. Esto puede ocurrir con simples cambios ambientales de presión y temperatura. La trimebutina maleato, Figura 1 es un IFA utilizado para el tratamiento de trastornos gástricos. En esta contribución se presentan algunos resultados de la predicción de posibles polimorfos de la trimebutina maleato usando el método Hydrogen Bond Propensities del programa Mercury y su correlación con los polimorfos obtenidos en el laboratorio bajo diferentes condiciones de cristalización. Los productos fueron caracterizados por espectroscopia ATR-IR, análisis térmico TGA-DSC y técnicas de difracción de rayos X.

Figura 1. Estructura de la trimebutina

Agradecimientos: los autores agradecen a la Vicerrectoría de Investigación y Extensión, y al laboratorio de rayos X, UIS-PTG, de la Universidad Industrial de Santander (UIS) Bucaramanga, Colombia, por el registro de los datos de difracción



ESTUDIO DE LAS INTERACCIONES DEL PEPTIDO ALYTESERIN 1C Y DE UN ANÁLOGO SOBRE MODELOS DE MEMBRANAS

Kevin Sanchez Arias ^a, Alberto Aragón Muriel ^b, Juan D. Londoño ^b, Dorian Polo Cerón ^b, José F. Oñate Garzón ^{a*}.

^a Grupo de Investigación en Química y Biotecnología (QUIBIO), Universidad Santiago de Cali, Colombia.

^b Grupo de Investigación en Catálisis y Procesos (LICAP), Universidad del Valle, Colombia.

* Autor de correspondencia: jose.onate00@usc.edu.co

Palabras clave: Péptidos antimicrobianos; catiónica; membranas sintéticas; DSC; FTIR-ATR.

Los péptidos antimicrobianos hacen parte de la inmunidad innata de la mayoría de los seres vivos, poseen una actividad sobre bacterias, virus, hongos y parásitos. Sus características catiónicas los hacen selectivos contra membranas de superficie aniónicas. Se estudiaron los péptidos *Alyteserin 1C* de carga neta +2 y un análogo de carga neta +5 sobre modelos de membranas sintéticas que simulan la superficie de membranas de bacterias Gram-negativas y eritrocitos humanos, haciendo uso de Calorimetría diferencial de barrido (DSC) para determinar el efecto de los péptidos sobre el comportamiento termotrópico de las membranas. Otra herramienta fue la espectroscopia infrarroja con reflexión total atenuada (FTIR-ATR) que permitió analizar el desplazamiento de las vibraciones de los grupos carbonilo, metilo, fosfato y amida, señales características para explicar las interacciones del peptido sobre las membranas sintéticas y la composición Hélice- α y Hoja- β de los péptidos. Los resultados demostraron disminución de la entalpia (Δ H) y (Δ Tm), son factores de aumento en la fluidez de las membranas, por otro lado, los desplazamientos vibracionales de las bandas aumentaron confirmando los cambios ejercidos por los péptidos sobre la composición de los fosfolípidos.

IX SIMPOSIO DE QUÍMICA APLICADA (IX SIQUIA) Y I CONGRESO INTERNACIONAL DE NANOQUÍMICA, NANOFÍSICA Y NANOMEDICINA (I CINNN)

DEVELOPMENT OF STABLE NANOEMULSIONES OF S-(-)-LIMONENE USING ULTRACAVITATION

Víctor M. Jaramillo-Pérez a, Erika A. Torres-Reyes a, Mario A. Barón-Rodríguez a, Leonor Y. Vargas-Méndez a*. ^a Environmental Research Group for Sustainable Development, Santo Tomas University, Bucaramanga, Colombia * Corresponding author: leyavar@gmail.com

keywords: Dynamic light scattering; nanoemulsions; S-(-)-limonene; Zeta potential; turbidity.

High energy methods for the development of nanoemulsions, as ultracativation, had took force in the past years. This methodology allows the development of stable nanometric systems using ultrasonic waves. S-(-)-limonene is a monoterpene whit a great variety of remarkable biological activities, but is stability in aqueous systems is poor. That's way, in this investigation it was proposed to development stable nanoemulsions of S-(-)-limonene.

For the preparation, the suspension of S-(-)-limonene, Tween 20 and propylene glycol were mixed-up for 60 seconds in a high energy ultrasonic generator; at this point all systems were white. In order to study its stability, the emulsions were allowed to age for 24 hours; after a dilution, of the clear phase, the turbidity was measured whit an UV-Vis; the Zeta potential and the size was determined using a dynamic light scattering system.

After 24 hours of preparation (hop) the clear phase of the emulsion had a slope of -0.00056±0.00026 τ/min, as the slope is negative, based on the turbidity ratio measurement analysis, the system it could be consider as stable. After 48 hop the nanoemulsions had a slope of -0.00056±0.00016 τ /min, and finally at 72 hop -0.00066±0.00011 \tau/min. As the emulsion had more negative slope at 72 hop the size and the Zeta potential were measured in this time showing a size of 162.75±3.46 nm and a Zeta potential of -19.05±1.48 mV; meaning that this nanometric system is relative stable based on the Zeta potential

Results suggest that the formation of S-(-)-limonene, Tween 20 and propylene glycol nanoemulsions by homogenization for 60 seconds leads to the formation of relatively stable systems.



SÍNTESIS DE NUEVOS HÍBRIDOS SULFONAMIDA-CHALCONA Y SULFONAMIDA-PIRAZOLINA DERIVADOS DE LA 4-METOXIACETOFENONA

Lina F. Castaño a*, Alberto Insuasty b, Jairo Quiroga a, Rodrigo Abonia a, Braulio A. Insuasty a.

^a Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos, Universidad del Valle, Colombia

Palabras Claves: Chalconas; híbridos moleculares; pirazolinas; sulfonamidas; 4-metoxiacetofenona.

La hibridación molecular constituye una de las herramientas más empleadas para el diseño estructural y funcional de compuestos con potencial actividad biológica. Dicha estrategia, aprovecha las propiedades de una o más unidades farmacóforas con el objetivo de mejorar su actividad.[1] En este sentido, la combinación del núcleo sulfonamido con chalconas y pirazolinas ha proporcionado híbridos con actividad antibacterial,[2] anticancerígena,[3] y antioxidante.[4] Por lo anterior, en este trabajo se describe la síntesis de nuevas sulfonamidas 1a,b, a partir de las cuales se lleva a cabo la obtención de nuevos híbridos chalcona-sulfonamida 3a-f/4a-f mediante la condensación tipo Claisen-Schmidt con los aldehídos aromáticos 2a-f. Posteriormente, las chalconas 3b y 4b (R₂ = Cl) se hicieron reaccionar con monohidrato de hidracina dando lugar a los híbridos pirazolina-sulfonamida 6a,b y 7a,b.

Figura 1. Síntesis de nuevos híbridos chalcona-sulfonamída 3a-f/4a-f

Figura 2. Ruta sintética para la obtención de los híbridos pirazolina-sulfonamida 6a, b y 7a,b.

- [1]. Kucukoglu, K. et all., Enzyme Inhib. Med. Chem. 2016, 31, 20–24.
- [2]. Noreljaleel, A. E. et all., J. H. J. Nat. Prod. 2018, 81, 41-48.
- [3]. Inci, H. et all., Bioorg. Chem. 2018, 77, 411–419.
- [4]. Shringare, D. N. et all., Med. Chem. Res. 2018. 27, 1226–1237.

b Institut des Sciences Moléculaires de Marseille (iSm²), Aix-Marseille Université, Francia
* Autor de correspondencia: lina castano, esquilin@correounivalle.edu.co

PERSPECTIVES ON THE BIOMEDICAL USE OF THE FLAVONOL **OUERCETIN AND ITS DERIVATIVES: A REVIEW ON REPORTED** EFFECTS AND GAPS BASED ON BIOINFORMATICS

Lina M. García a, Carlos F. Morantes-Ariza A, Felipe Rojas-Rodríguez b, Diana Molina a, Daniela Ma. Ramírez a, Alexandra Arias a, David Cardona a, Nicolás Luna a, Simón Torres a, Valeria Velandia a, Manuela Londoño c, Andre J. Riveros a*.

- ^a Programa de Biología. Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas. Universidad del Rosario. Bogotá. Colombia.
- ^b Departamento de Nutrición y Bioquímica. Facultad de Ciencias. Pontificia Universidad Javeriana. Bogotá. Colombia.
 - ^c Departamento de Ciencias Fisiológicas. Facultad de Medicina. Pontificia Universidad Javeriana. Bogotá. Colombia.

* Corresponding author: <u>andre.riveros@urosario.edu.co</u>

Keywords: Flavonoid; metabolite; *Quercus*; polyphenol.

Flavonoids are among the secondary plant metabolites most intensely studied over the last decades. The reason for this surge in interest come from the evidence supporting multiple effects on human and animal health, particularly based on antioxidant functions. Importantly, among flavonoids, Quercetin, a naturally occurring molecule originally derived from the tree *Quercus* has been at the core of research. Quercetin has functions ranging from antioxidant to antiapoptotic, cell growth regulator, antidiabetics and anti-inflammatory. Following these findings, synthetic and naturally occurring Quercetin derivatives have received increasing attention. Focusing on derivatives enables an understanding of the pathways that underlie the activity of each molecule as each variant may target specific points along the pathway. In turn, understanding the structural and functional relationships among molecules will enable better targeting in biomedicine. Thus, we aimed to analyze the chemical structural similarity profiles among Quercetin and its derivatives, further identifying the biological functions and suggesting targets for research based on a literature review. As a result of these approaches, we built a similarity tree based on molecular structure and 2,326 traits extracted from NCBI through ChemmineR package for R. Following the review, we identified major biological activities and the main physiological systems and organs targeted by each derivative of Quercetin. Biological activities for each molecule were selected following a bibliographic search using the databases Web of Science, Scopus and PubMed. The complete records and cited references of the 38,185 identified manuscripts were imported into VOSviewer for the bibliometric analysis. We found that R-O-R' and R-O-S functional groups played a major role in the determination of the similarity profiles. Moreover, we found a large variation in the number of studies that focus on all molecules. The most studied systems were the nervous, liver, cardiac and immune, whereas the most studied functions were antioxidant, antibacterian, anti-inflammatory, antiviral, antineoplasic, and the inhibition of tyrosine kinase, MAO and TNF alpha. Based on these results we point at least 11 gaps of functions based on similarity and further discuss new targets.



SÍNTESIS DE NUEVOS TRANSPORTADORES DE HUECOS (HTMS) BASADOS EN SELENOFENO PARA CELDAS SOLARES DE PEROVSKITA (PSCS)

<u>Luis A Illicachi</u> ^{a,b*}, Javier Urieta ^{c,d}, Agustín Molina ^c, Alejandro Ortiz ^{a,b}, Braulio Insuasty ^{a,b}, Nazario Martin ^{c,d}, Mohammad K. Nazeeruddin ^e.

^a Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos, Departamento de Química, Universidad del Valle, Cali, Colombia

^b Centro de Bioinformática y Fotónica-CIBioFI, Universidad del Valle, Cali, Colombia

^c IMDEA-Nanociencia, Ciudad Universitaria de Cantoblanco, Madrid, España

^d Departamento Química Orgánica, Facultad C. C. Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España

^e Group for Molecular Engineering of Functional Materials, EPFL VALAIS, CH-¹⁹⁵¹ Sion, Switzerland

* Autor de correspondencia: luis.illicachi@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Selenofeno; transportador de huecos, perovskita, fotovoltaica.

La contaminación ambiental y el cambio climático originado a partir de la quema de combustibles fósiles, está causando un daño irreparable en la diversidad biológica, el clima y la economía mundial. Por lo tanto, para alcanzar el progreso sostenible de nuestra sociedad, el desarrollo de energías renovables alternativas es de gran importancia. Entre estas fuentes de energía alternativa, la energía solar es particularmente atractiva debido a su abundancia, fácil accesibilidad y limpieza. Hoy en día una de las tecnologías más representativas en conversión de energía solar a energía eléctrica son las celdas solares de Perovskita (PSCs) debido al uso de precursores económicos, simples métodos de fabricación y remarcables eficiencias en conversión de energía.

Por otra parte, los materiales transportadores de huecos (HTMs) son esenciales para la obtención de dispositivos altamente eficientes. El HTM más ampliamente usado debido a su gran rendimiento en PSCs es el 2,2′,7,7′-tetrakis(*N.N*-di-*p*-metoxifenilamina)-9,9′-*spiro*bifluoreno (Spiro-OMETAD). Sin embargo, los tediosos y costosos pasos de síntesis y purificación limitan significativamente su compatibilidad practica para aplicaciones fotovoltaicas a gran escala y de bajo costo. Por lo tanto, para superar estos inconvenientes, los HTMs de alta eficiencia basados en moléculas pequeñas han sido ampliamente estudiados. En este sentido, presentamos la síntesis y caracterización de tres nuevos HTMs basados en el núcleo selenofeno, los cuales fueron probados en PSCs utilizando la Perovskita de composición [FAPbI₃]_{0.85}[MAPbBr₃]_{0.15}. Los resultados preliminares evidencian un rendimiento moderado para los compuestos **TPASePh-1** y **TPASePh-3** con valores de 13.15 y 10.52% respectivamente. Cabe resaltar que los resultados obtenidos muestran que la unión directa entre el núcleo selenofeno y los fragmentos de trifenilamina favorecen las propiedades de transporte de huecos permitiendo obtener dispositivos con eficiencias moderadas.

DISEÑO, SÍNTESIS Y EVALUACIÓN BIOLÓGICA DE NUEVOS HÍBRIDOS TIAZOLIL-PIRAZOLINA CON MOSTAZA NITROGENADA

Viviana Cuartas a, b*, Jairo Quiroga a, Rodrigo Abonia a, María P. Crespo c, Maximilino Sortino d, Susana Zacchino d, Manuel Nogueras ^e, Justo Cobo ^e, Braulio Insuasty ^{a, b}.

b Centro de Investigación e Innovación en Bioinformática y Fotónica -CIBioFI, Cali, Colombia ^c Grupo de Biotecnología e Infecciones Bacterianas, Departamento de Microbiología, Universidad del Valle,

Cali, Colombia

d Área Farmacognosia, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, Universidad Nacional de Rosario, Suipacha 531, (2000), Rosario, Argentina

^e Departamento de Química Inorgánica y Orgánica, Universidad de Jaén, Jaén, ²³⁰⁷¹, España * Autor de correspondencia: <u>viviana.cuartas@correounivalle.edu.co</u>

Palabras Claves: Tiazol; pirazolina; mostaza nitrogenada; actividad antimicrobial.

Las infecciones antimicrobianas son una preocupación de salud pública mundial debido a la aparición de cepas resistentes a múltiples fármacos (MDR), estos patógenos pueden exhibir diferentes mecanismos para anular las acciones de los antibióticos como reducción de la permeabilidad, mutación del sitio activo, modificación enzimática y adquisición de vías metabólicas alternas. Por lo anterior, existe la necesidad de encontrar nuevos compuestos con propiedades antimicrobianas mediante la síntesis de moléculas biológicamente activas, entre ellos se destacan los derivados tiazólicos, los cuales muestran un papel importante debido a sus propiedades biológicas como antibacteriales, antifúngicos, antinflamatorios, analgésicos, antipiréticos y antitumorales. Asimismo, muchas investigaciones indican que la mostaza nitrogenada es una importante clase de agente alquilante debido a su alta reactividad química, aunque este fragmento es ampliamente usado en el diseño de compuestos con actividad antitumoral, existen pocos estudios que exploren el potencial de este fragmento en la inhibición de microorganismos.

Teniendo en cuenta la amplia aplicación médica de los derivados tiazol y mostaza nitrogenada, se llevó a cabo la síntesis de un nuevo tiazol-N-mostaza, el cual se empleó en el diseño de cuatro nuevas series de tiazol-pirazolinas. Todos los derivados se seleccionaron para estudios de actividad antifúngica, obteniendo compuestos que exhiben una alta actividad frente a Cryptococcus neoformans con valores de MIC₅₀ de 3.9-7.8 μg/mL. Además, la actividad antibacteriana in vitro se evaluó frente a bacterias de tipo salvaje y resistente a múltiples fármacos obteniendo compuestos con importante actividad contra S. aureus resistente a meticilina (MRSA) y vancomicina (VISA). De igual modo, se obtuvo actividad discreta frente a N. gonorrhoeae, la cual es una bacteria de gran interés debido a la aparición de cepas multiresistentes y extremadamente resistentes a los medicamentos empleados.

^a Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos, Departamento de Química, Universidad del Valle, A. A. ²⁵³⁶⁰ Cali, Colombia



SÍNTESIS DE DERIVADOS DE TRIFENILAMINA UNIDOS AL NÚCLEO MOLECULAR BODIPY Y EVALUACIÓN DE SUS PROPIEDADES DE TRANSPORTE DE CARGA

Juan S. Rocha-Ortiz a*, Alberto Insuasty b, Alejandro Ortiz a,c.

^a Grupo de investigación de compuestos heterocíclicos, Universidad del Valle, Colombia.

^b Institute Of Science Molecular De Marseille (iSm²), Aix-Marseille Université, Francia

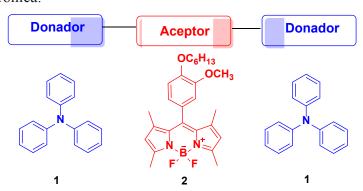
^c Centro de investigacion e información en bioinformatica y fotónica-CiBioFi, Universidad del Valle, Colombia.

*Autor de correspondencia: juan.rocha@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Trifenilamina; BODIPY; transferencia electrónica intramolecular; cromóforo.

Los compuestos derivados de trifenilamina y BODIPY han presentado interesantes propiedades para su aplicación en diferentes tecnologías como: celdas solares y OLEDs.[1][2] El motivo de esta investigación es evaluar si nuevos compuestos con una composición basada en trifenilamina-BODI-PY presentan buenas propiedades que potencialmente les permitan ser empleados en las aplicaciones mencionadas anteriormente u otras. La evaluación de sus propiedades se lleva a cabo mediante estudios de absorción, emisión, electroquímica y cálculos computacionales.

En este trabajo se presentan sistemas push-pull con dos unidades de trifenilamina como fragmentos electro-dadores y la unidad BODIPY 2 como fragmento electro-aceptor, que a su vez juega el papel de antena o colector de fotones. Estos fragmentos son enlazados a través de reacciones de acople cruzado catalizadas por paladio y dependiendo de la forma de enlace se pueden modular sus propiedades de transferencia electrónica.



[1]. Wanwong, S.; Surawatanawong, P.; Khumsubdee, S.; Kanchanakungwankul, S.; Wootthikanokkhan, J. *Heteroat. Chem.* **2016**, *27* (5), 306–315.

[2]. Liao, J.; Wang, Y.; Xu, Y.; Zhao, H.; Xiao, X.; Yang, X. Tetrahedron 2015, 71 (31), 5078–5084.

EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA DE HOJAS Y TALLOS DE *JUSTICIA AUREA* (ACANTHACEAE)

Laura N. Quiroga Arias a*, Andrés M. Rojas Sepúlveda b, Clara J. Durango García b.

^a Universidad del Quindío, Colombia

^b Universidad Antonio Nariño, Colombia

* Autor de correspondencia: lnquirogaa@uqvirtual.edu.co

Palabras Claves: Identificación; metabolitos secundarios; cristales.

En diferentes estudios del genero Justicia se han identificado sustancias que presentan efectos antibacterianos, antifúngicos y anticancerígenos. Para la especie *Justicia aurea*, hasta la fecha no presenta reportes de relevancia que indiquen que tipos de metabolitos presenta, así como su posible potencial. *J. aurea* es una especie que se reproduce en el departamento del Quindío, proponiéndola como un potencial de estudio para la identificación de sus metabolitos secundarios como posibles fármacos antimicrobianos. Las hojas de la especie *J. aurea*, se colectaron en el Jardín Botánico del Quindío (JBQ), en la ciudad de Calarcá, un espécimen fue colectado para cotejo en Herbario de la Universidad del Quindío (HUQ). El extracto fue obtenido por medio de maceración a temperatura ambiente colectando el solvente para su recirculación. En la eliminación del disolvente de forma natural y lenta se logró identificar la presencia de una forma cristalina. Los cristales se han estado obteniendo y se han realizado los respectivos lavados con disolventes para lograr la purificación y recristalización, El seguimiento del comportamiento de las de los cristales se realiza por cromatografía en capa fina (CCF), así como la caracterización mediante las diferentes evaluaciones cualitativas para la identificación de carbohidratos Fehling, Benedic, Selivanoff obteniendo resultados positivos para estas.



SÍNTESIS DE LIGANDOS DEL TIPO 4-(ALQUILAMINO) PENTAN-2-ONA Y 4-(ALQUILAMINO)PENT-3-EN-2-ONA A PARTIR DE 2-AMINOÁCIDOS Y SU USO COMO POSIBLES AGENTES QUELATANTES DE IONES METÁLICOS

Laura Cubillos a, Natalia Rincón a, Diego Quiroga a*.

a Universidad Militar Nueva Granada (UMNG), Facultad de Ciencias Básicas y Aplicadas, Departamento de Química, Carrera ^{11 101 80}, Bogotá, Código Postal ¹¹¹³²¹, Colombia * Autor de correspondencia: diego.quiroga@unimilitar.edu.co

Palabras Claves: Enaminas; aminoácidos; aminas; reducción; complejos de coordinación.

En este trabajo, se presenta la síntesis de complejos metálicos empleando ligandos del tipo 4-(alquilamino)pentan-2-ona 1 y 4-(alquilamino)pent-3-en-2-ona 2 respectivamente, derivados de aminoácidos simples. Los compuestos 1 fueron obtenidos en dos etapas, una esterificación inicial del aminoácido (fueron usados L -triptófano, L -tirosina y L -fenilalanina), con metanol y cloruro de trimetilsilano, seguido por reacción con acetilacetona en presencia de TEA, con rendimientos entre 60 y 75%, mientras que los compuestos 2 fueron obtenidos por reducción con borohidruro de sodio de 1, con rendimientos entre 81 y 92%. Los complejos metálicos fueron obtenidos disolviendo el respectivo ligando (1 o 2), en KOH alcohólico al 4% en presencia de sales de inorgánicas (sulfato de cobre (II) y cloruro de cobalto (II)) (64-85% de rendimiento). Con el fin de entender la estabilidad y naturaleza estructural de los complejos obtenidos, cálculos computacionales DFT-B3LYP al nivel LANL2DZ fueron realizados. Descriptores computacionales como índices de Fukui, cargas de Mulliken y GAP HOMO-LUMO demostraron que el tautómero enamina predomina sobre la forma imina en 1, favoreciendo la quelatación por los heteroátomos nitrógeno y oxígeno. Los índices de Fukui y las cargas de Mulliken evidencian mayor carácter quelante sobre los átomos de nitrógeno, los cuales, al presentar mayor densidad electrónica, tienden a coordinar los centros metálicos y dada la presencia del grupo carbonilo adyacente, tienden a mostrar un comportamiento bidentado. Se evidencia que los orbitales responsables de la absorción en la región UV-Vis de los complejos derivados de 1 y 2 conducen a transiciones electrónicas entre HOMO y LUMO, involucrando solapamiento entre orbitales d de los centros metálicos y orbitales no enlazantes de los grupos enamina-carbonilo para ligandos tipo 1 y amina-carbonilo para ligandos tipo 2. Los complejos presentaron bandas de absorción intensas alrededor de 780 y 840 nm, respectivamente, con un coeficiente de absortividad molar elevado, lo cual corrobora el potencial de este tipo de ligandos como agentes quelantes de iones metálicos.

Producto derivado del PIC-CIAS-2906, financiado por la Vicerrectoría de investigaciones de la Universidad Militar Nueva Granada - Vigencia 2019.

.

SÍNTESIS DE DIACETATO DE GLICERALDEHÍDO USANDO LIPASA B DE CANDIDA ANTARCTICA INMOVILIZADA SOBRE OCTIL-AGAROSA

Esteban D. Plata a*, Mónica L. Ruiz a, John J. Castillo a, Claudia C. Ortiz b, Roberto Fernández-Lafuente c.

^a Grupo de investigación en Bioquímica y Microbiología (GIBIM), Universidad Industrial de Santander, Colombia.

^b Escuela de Microbiología, Universidad Industrial de Santander Colombia.

^c Departamento de biocatálisis-ICP-CSIC. Universidad Autónoma de Madrid, España.

* Autor de correspondencia: stbnplata29@gmail.com

Palabras Claves: Biocatálisis; lipasas inmovilizadas; síntesis orgánica; glicerol.

La catálisis enzimática ha demostrado ser una herramienta útil para la síntesis orgánica ya que usando condiciones suaves permite acelerar la velocidad y mejorar la quimioselectividad de las reacciones. Entre las enzimas usadas en síntesis orgánica destacan las lipasas ya que estas poseen un amplio rango de aplicabilidad además de alta regioselectividad y enantioselectividad. Se ha demostrado que además de permitir el reúso de los biocatalizadores, la inmovilización en soportes sólidos potencia la actividad catalítica y la selectividad de estas enzimas. Con el fin de explotar la regioselectividad de las lipasas y además de darle uso a la triacetina (1), se desarrolló una metodología de síntesis para preparar el diacetato de gliceraldehído (3).

Como se muestra en el esquema 1, el diacetato de gliceraldehído (3) se obtuvo a partir de la oxidación con PCC en diclorometano de la 1,2-diacetina (2), la cual se preparó a partir de la hidrólisis de triacetina (1) catalizada por la lipasa B de *Candida antarctica* inmovilizada en soporte octil-agarosa (CALB-OC). Todos los compuestos sintetizados fueron caracterizados por IR, GC-MS y RMN.

Esquema 1. Síntesis biocatalizada por CALB-OC de diacetato de gliceraldehído (3) a partir de triacetina (1).



ESTUDIO POR ESPECTROSCOPIA INFRARROJO Y RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE ¹H DEL EQUILIBRIO TAUTOMÉRICO IMINA-ENAMINA EN COMPUESTOS DEL TIPO 3-(ALQUILAMINO)-1,3-DISUSTITUIDOPROP-2-EN-1-ONA

<u>Diego Quiroga</u> a*, <u>Paola Borrego-Muñoz</u> a, Lili Becerra a.

^a Universidad Militar Nueva Granada (UMNG), Facultad de Ciencias Básicas y Aplicadas, Departamento de Química,

Carrera ^{11 101 80}, Bogotá, Código Postal ¹¹¹³²¹, Colombia

* Autor de correspondencia: diego.quiroga@unimilitar.edu.co

Palabras Claves: Imina; enamina; aminoácidos; IR; RMN-1H; cálculos computacionales DFT.

En este trabajo, se presenta el estudio del equilibrio tautomérico imina-enamina en compuestos del tipo 3-(alquilamino)-1,3-disustituidoprop-2-en-1-ona 1 empleando espectroscopia infrarroja (IR-TF) y resonancia magnética nuclear de ¹H (RMN-¹H). Los compuestos 1 fueron sintetizados en dos etapas: esterificación del aminoácido por reacción con alcoholes alifáticos; seguido por la reacción de 2 con compuestos 1,3-dicarbonílicos 3. Cálculos computacionales DFT-B3LYP al nivel 6-31G(d,p), fueron empleados para calcular las frecuencias de absorción en la región del IR de cada tautómero. Se hizo una comparación de las frecuencias de absorción calculadas vs experimentales en fase sólida. Los resultados muestran que para 1a-d se evidencia una tendencia por el tautómero enamina en fase sólida, lo cual se corrobora por la correlación entre las frecuencias experimentales y calculadas, especialmente las correspondientes al estiramiento asimétrico del fragmento C=C-C=O (e.g. 1a, exp. 1716 cm⁻¹, calc. 1712 cm⁻¹). Los derivados **1e-1** mostraron mayor correlación con la forma imina, lo cual se evidencia por las bandas correspondiente al estiramiento C=N (e.g. 1e, exp. 1716 cm⁻¹, calc. 1694 cm⁻¹). Experimentos unidimensionales RMN ¹H fueron realizados a disoluciones de los compuestos 1a-l en CDCl, y DMSO-d, a 25 °C. La señal entre 3,30 y 3,70 ppm, la cual integró para un átomo de hidrógeno, fue asignada al grupo metino del fragmento enamina. Por otro lado, la señal entre 7.15 y 7.40 ppm fue asignada al hidrógeno N-H. Los resultados obtenidos sugieren que el tautómero enamina es favorecido únicamente para compuestos 1 con un grupo C=O en posición 3 y de cadena abierta, mientras que la presencia de grupos COOR y/o cadenas cíclicas favorece la forma imina en estado sólido. Por otro lado, se evidencia que la forma enamina es favorecida en disolución empleando disolventes de mediana a alta polaridad, lo que corrobora que este equilibrio tautomérico está fuertemente influenciado por la polaridad del disolvente.

Producto derivado del IMP-CIAS-2923, financiado por la Vicerrectoría de investigaciones de la Universidad Militar Nueva Granada - Vigencia 2019.

CRYSTAL STRUCTURE OF MIRABEGRON BY X-RAY POWDER DIFFRACTION DATA

Angie P. Tamayo a*, Robert A. Toro a, José A. Henao a.

a Grupo de Investigación en Química Estructural, Universidad Industrial de Santander, Colombia. * Corresponding autor: angie.tamayo@correo.uis.edu.co

keywords: Mirabegron; powder diffraction; rietveld refinement; density functional theory.

Mirabegron is a beta-3 adrenergic agonist that is used for treatment of overactive bladder syndrome. It is a member of 1,3-thiazoles and a monocarboxylic acid amide. The crystal structure of mirabegron has been solved and refined using X-ray powder diffraction data and optimized using density functional techniques. The mirabegron crystallized in a triclinic system and space group P1(No. 1) with parameters: a=5.3496 Å, b=11.6104 Å, c=17.5949 Å, $\alpha=70.740^{\circ}$, $\beta=84.396^{\circ}$, $\gamma=86.269^{\circ}$, V=1026.11Å³ and Z=1. In the crystalline structure there are multiple hydrogen bonds intra and inter molecular, π -interactions and hydrogen- π interactions. The molecular packing and crystal energy are dominated by van der Waals attractions. Finally, the result of the density functional theory (DFT) optimization was used as the starting model for the final refinement. All non-H bond distances and angles were subjected to restraints, based on a Mercury Mogul Geometry Check (Bruno et al., 2004; Sykes et al., 2011) of the molecule.

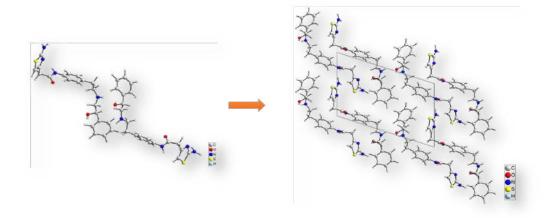


Figure 1. (Left) Asymmetric unity of mirabegron with two molecules independent crystallographic: (Right) The crystal structure, viewed down the a-axis.



IDENTIFICACIÓN Y ANÁLISIS DE METABOLITOS SECUNDARIOS PRESENTES EN EL EXTRACTO HEXÁNICO DE LA ESPECIE IPOMOEA TRIFIDA (CONVOLVULACEAE)

Daniel F. Vélez a*, Paula A. Charry a, Eunice Ríos a.

^a Grupo Químico de Investigación y Desarrollo Ambiental, Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías, Universidad del Quindío, Colombia. * Autor de correspondencia: dívelezg@uqvirtual.edu.co

Palabras Claves: Convolvulaceae; *Ipomoea trifida*; metabolitos secundarios; cromatografía de gases; espectrometría de masas.

La familia Convolvulaceae comprende casi 1650 especies predominantemente tropicales. El género *Ipomoea* contiene aproximadamente 500-600 especies. El género Ipomoea se encuentra ampliamente distribuido a nivel mundial, en especial en las regiones tropicales, subtropicales y templadas de ambos hemisferios. La mayoría de las plantas de este género son enredaderas con tallos enroscados que alcanzan de 1 a 5 metros. En Colombia la familia Convolvulaceae cuenta aproximadamente con 13 géneros y 81 especies de las cuales 39 pertenecen al género Ipomoea, en el país, se han reportado principalmente cuatro especies de la familia Convolvulaceae, consideradas como plantas con potencial invasivo que afectan la producción de los cultivos de café: *Ipomoea hederifolia* L., *Ipomoea purpurea* (L) Roth, *Ipomoea tiliaceae* (Willd) Choisy e *Ipomoea trifida* (H.B.K.) G. Don. La mayoría de las plantas pertenecientes a esta familia son reconocidas por poseer células secretoras de resinas glicosídicas con propiedades hemolíticas, antibacterianas y antifúngicas, entre otras.

Debido a que a los metabolitos secundarios presentes en las plantas se les atribuye propiedades fitoterapeúticas se realizó la extracción de éstos en el extracto hexánico de la especie *Ipomoea trifida*; A 16.3 g de extracto, se le realizó fraccionamiento primario por medio de cromatografía en Columna utilizando gel de sílice como fase estacionaria y como fase móvil se usaron diferentes solventes iniciando con hexano 100%, aumentando su polaridad así: C₆H₁₄-CHCl₃, CHCl₃-Me₂CO, Me₂CO-MeOH hasta MeOH 100%, obteniéndose un total de XII fracciones. Se observó la formación de cristales en las fracciones III y IV, las cuales se analizaron por espectrometría de masas (EM), así como técnicas de resonancia magnética nuclear (RMN-1H, RMN-13C, DEPT) en sus diferentes modalidades multidimensionales (HSQC, HMBC, COSY y NOESY), evidenciándose al momento la presencia de un posible esterol y un alcaloide. Las demás fracciones se encuentran en proceso de purificación.

BÚSQUEDA Y AISLAMIENTO DE METABOLITOS SECUNDARIOS EN FRACCIONES POLARES DEL EXTRACTO TOTAL (PARTES AÉREAS) DE RENEALMIA LIGULATA (ZINGIBERACEAE)

Yeferson Ospina a*, Paula A Charry a, Eunice Ríos a.

^a Grupo Químico de Investigación y Desarrollo Ambiental, Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías, Universidad del Quindío, Cra. ¹⁵ calle ¹²N, Armenia, Colombia. *Autor de correspondencia: yospinab 1@uqvirtual.edu.co

Palabras Claves: Zingiberaceae; *Renealmia*; diarilheptanoides; cromatografía.

La familia *Zingiberaceae*, es la más grande dentro del orden Zingiberales, presenta aproximadamente 50 géneros y 1000 especies, las especies de esta familia son hierbas perennes, que se caracterizan por tener rizomas rastreros y terrestres. La composición química de esta familia comprende principalmente: terpenoides, diarilheptanoides, arilalcaloides, fenilpropanoides, fenilbutanoides, flavonoides y compuestos relacionados. *Renealmia L.f.*, es uno de los géneros de plantas tropicales que pertenecen a la familia *Zingiberaceae*, comprende alrededor de 85 especies, de las cuales 62 se encuentran en el trópico americano. El propósito de este estudio fue indagar acerca del contenido metabólico de las fracciones más polares obtenidas del extracto total de la especie *Renealmia ligulata* y adicionalmente evaluar su respuesta a diferentes actividades biológicas, principalmente como agentes antibacteriales, antifúngicos o antiofídicos.

Se utilizaron partes aéreas de R. ligulata colectadas en la Reserva Natural la Montaña del Ocaso en el Municipio de Quimbaya-Quindío; un especimen de la especie fue ingresado a la colección del herbario de la universidad del Quindío, bajo el número 029953. Al extracto obtenido con CH₂Cl₂: MeOH se le realizó fraccionamiento primario empleando disolventes de polaridad creciente, obteniendo 10 fracciones totales, a las 5 fracciones más polares se les realizó fraccionamiento secundario, por cromatografia de columna empleando gel de sílice como fase estacionaria y como fase móvil se utilizaron mezclas de disolventes: cloroformo, cloroformo: acetona, acetona, cloroformo: metanol y metanol. La homogeneidad de las fracciones se evaluó mediante cromatografía en capa fina, usándose como agente revelador una lámpara UV y CeSO4/H₂SO₄ amoniacal. Una vez se obtuvieron fracciones menos complejas, se usaron diferentes técnicas cromatográficas y de esta manera se purificaron los compuestos obtenidos. Se han obtenido hasta el momento 2 sólidos de 2 de las fracciones analizadas y se avanza con el fraccionamiento y purificación de las fracciones restantes. Los compuestos obtenidos se analizarán empleado espectrometría de masas (EM), espectroscopia de infrarrojo (IR) y de ultravioleta-visible (UV/VIS), técnicas de resonancia magnética nuclear (RMN-1H, RMN-13C, DEPT) en sus diferentes modalidades multidimensionales (HSQC, HMBC, COSY y NOESY) y por último la difracción de rayos X (en caso de obtener cristales).



BÚSQUEDA Y AISLAMIENTO DE METABOLITOS SECUNDARIOS Y OBTENCIÓN DEL ACEITE ESENCIAL PRESENTE EN LOS RIZOMAS DE RENEALMIA LIGULATA (ZINGIBERACEAE)

Jonatan Tangarife a*, Paula A Charry a, Eunice Ríos a.

a Grupo Químico de Investigación y Desarrollo Ambiental- QIDEA-, Programa de Química, Facultad de Ciencias
Básicas y Tecnologías, Universidad del Quindío, Colombia.
* Autor de correspondencia: jtangarifes@uqvirtual.edu.co

Palabras Claves: Zingiberaceae; *Renealmia ligulata*; rizomas; aceite esencial; diarilheptanoides.

Renealmia es un género de la familia Zingiberaceae con innumerables usos como ornamental, medicinal y alimenticio. Este género es de gran importancia debido a su potencial fuente de recursos agroeconómicos, aspectos botánicos, ecológicos, farmacológicos, y agronómicos. De un universo de 87 especies formalmente insertadas en *Renealmia*, se ha registrado el uso popular de 18 de ellas. En su mayor parte las indicaciones de uso están asociadas a R. alpinia, R. exaltata y R. guianensis englobando, principalmente, los usos ornamental, alimenticio y medicinal. Entre las 14 especies con indicación de uso popular medicinal, se registran investigaciones farmacológicas para solo cuatro de ellas: R. alpinia, R. exaltata, R. nicolaioides y R. thyrsoidea. La colecta de la especie, se realizó en la vereda La Concha, Municipio de Circasia - Quindío, y un espécimen de la especie fue ingresado al herbario de la Universidad del Quindío, bajo el número 029953. Los rizomas secos y molidos se maceraron inicialmente a temperatura ambiente con hexano. El material residuo fue extraído con CH₂Cl₂: MeOH. Éste extracto fue llevado a fraccionamiento primario en cromatografía de columna, utilizándose gel de sílice como fase estacionaria (230-400 mesh), y como fase móvil mezclas de disolventes: (Hexano 100%, Hex: AcOEt, AcOEt 100%, AcOEt: MeOH y MeOH 100%). Se obtuvieron 9 fracciones finales, de las cuales, hasta el momento, las fracciones V y VI han sido sometidas a fraccionamiento secundario.

En las fracciones menos polares se obtuvieron cristales en forma de agujas. Las fracciones F-I a F-IV, mostraron un aspecto de grasas, mientras que en F-VII se obtuvo un sólido cristalino con características de una sal; en las fracciones F-VIII y F-IX se obtuvieron sólidos, los cuales se encuentran en procesos de análisis cromatográficos y espectroscópicos. Se realizaron análisis por infrarrojo de los compuestos obtenidos, dando indicios de la presencia de metabolitos interés, tales como flavonoides y diarilheptanoides. De los rizomas secos y molidos fue extraído el aceite esencial utilizando hidrodestilacion por microondas y acoplado a Clevenger, se obtuvo un aceite amarilloso soluble en etanol y diclorometano, el cual se encuentra en análisis por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas.

BÚSQUEDA Y AISLAMIENTO DE METABOLITOS SECUNDARIOS EN MIKANIA GUACO (ASTERACEAE)

Sebastián Perdomo a*, Paula A Charry a, Eunice Ríos a.

^a Grupo Químico de Investigación y Desarrollo Ambiental- QIDEA-, Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías, Universidad del Quindío, Colombia. * Autor de correspondencia: sperdomof 1@uqvirtual.edu.co

Palabras Claves: Asteraceae; Mikania guaco; aceite esencial; lactonas sesquiterpénicas; hidrodestilación; cromatografía de gases.

El género Mikania pertenece a la familia Asteraceae, la cual reúne más de 23.500 especies repartidas en unos 1600 géneros, por lo que son la familia de Angiospermas con mayor riqueza y diversidad biológica. El género Mikania tiene descritas 864 especies, de las cuales 450 son aceptadas y cerca del 20% han sido estudiadas fitoquimicamente. En esta investigación se trabajaron las partes aéreas de Mikania guaco, colectada en la vereda La Cristalina-Municipio de Circasia, en el Departamento del Quindío y un espécimen fue ingresado a la colección del herbario de la Universidad del Quindío, bajo el número 36928. A partir del material vegetal seco y molido se obtuvieron los extractos hexánico y total (CH₂Cl₂: MeOH). Para iniciar la búsqueda de los metabolitos secundarios, se seleccionó el extracto polar para el fraccionamiento primario por cromatografía de columna abierta (CC), se obtuvieron 9 fracciones finales. En las fracciones menos polares, se encontraron Acetil de β-amirina (1), Lupeol (2) y Estigmasterol (3) y en la más polar β-D-glucopiranósido de estigmasterilo (4) (ver figura). Tres fracciones de polaridad intermedia fueron analizadas por espectroscopia de infrarrojo (IR), en el análisis de los 3 IR se detectaron bandas a 3434, 3460, 3463 cm⁻¹, respectivamente, correspondientes a grupos hidroxilos; y bandas de grupo carbonilo correspondientes a γ-lactonas α-β- insaturadas en 1770, 1771; y 1765 cm⁻¹, y de grupos carbonilo adicionales a 1669, 1671 y 1684 cm⁻¹; los datos anteriores sugieren la presencia de lactonas sesquiterpénicas (LS) con grupo hidroxilo adicional en algún lugar de la estructura. Estas fracciones serán purificadas por CC. Adicional, de las partes aéreas fue aislado el aceite esencial por hidrodestilación acoplado a Clevenger, en el análisis por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas se identificaron 16 compuestos, principalmente, entre los constituyentes mayoritarios se encuentran alcoholes sesquiterpénicos, diterpenos y alcanos alifáticos.

Figura 1. Compuestos aislados de *Mikania guaco*



ESTUDIO DE LA ESTRUCTURA CRISTALINA DE FEXOFENADINA HIDROCLORURO, FEXOFENADINA Y ANÁLISIS COMPARATIVO DE **SOLUBILIDAD**

Cristian C. Rojas S. a*, Robert A. Toro H. a, José A. Henao M. a.

^a Grupo de investigación en Química Estructural (GIOUE), Universidad Industrial de Santander, Colombia. * Autor de correspondencia: ccrs11@hotmail.com

Palabras Claves: Fexofenadina; fexofenadina hidrocloruro; determinación estructural; solubilidad.

La solubilidad en medio acuoso de un principio farmacéuticamente activo (IFA) es una propiedad que influye directamente en la biodisponibilidad del fármaco en el organismo. La fexofenadina es un antihistaminico de tercera generación, antagonista selectivo de los receptores de la histamina H1, que se comercializa en forma de la sal cloruro para su administración vía oral. En las bases de datos cristalográficas no existen reportes estructurales del cloruro de fexofenadina (FEXCI), por el contrario, la base libre (FEX) está descrita en su forma monohidratada y metanol-solvatada. En esta contribución se mostrará la determinación estructural por difracción de Rayos X de FEXCl (Figura 1) y FEX, además, el estudio comparativo de sus solubilidades mediante espectroscopia ultravioleta. FEXCL indexa en un sistema triclínico con grupo espacial P-1 y parámetros de celda a= 6.395(4) Å, b= 15.19(17) Å, c= 15.632(8) Å, α = 78.582(44) °, β = 80.460(57) °, γ = 87.453(51) °, V= 1467(2) Å3 y Z=2. Por otra parte FEX se registra en un sistema monoclínico con parámetros de celda a= 12.604(6) Å, b= 9.853(2) Å, c= 23.884(4) Å, $\alpha = 90^{\circ}$, $\beta = 93.14(3)^{\circ}$, $\gamma = 90^{\circ}$, V= 2961.92(2) Å3 y Z=4 en un grupo espacial P21/a. El estudio de solubilidad determinó que FEXCL es más soluble FEX a condiciones de 37 °C y pH 3.

BÚSQUEDA DE COMPUESTOS CON ACTIVIDAD CITOTÓXICA EN HOJAS DE SAPIUM STYLARE (EUPHORBIACEA)

Derly L. Vanegas Suárez a*, Andrés M. Rojas Sepúlveda b, Clara J. Durango García b.

^a Universidad del Ouindío, Colombia

^b Universidad Antonio Nariño, Colombia

* Autor de correspondencia: <u>dlvanegass@uqvirtual.edu.co</u>

Palabras Claves: Aislamiento; identificación; metabolitos secundarios; anticancerígenos.

En estudios realizados del género Sapium, se han identificado prometedores agentes anticancerígenos. La especie Sapium stylare de la familia Euphorbiacea, presenta escasos estudios acerca de sus componentes químicos. S. stylare es endémica del departamento del Quindío, lo cual la hace una especie interesante y promisoria para establecer los metabolitos secundarios que se encuentran en la especie, y de qué manera se pueden proyectar como posibles fármacos en el tratamiento del cáncer. Las hojas de la especie S. stylare, se colectaron en el Jardín Botánico del Quindío (JBQ), en la ciudad de Calarcá, un espécimen fue colectado para cotejo en el Herbario de la Universidad del Quindío (HUQ). El extracto fue obtenido por medio de maceración a temperatura ambiente colectando el solvente para su recirculación, la separación y purificación de los solventes se realiza por medio del fraccionamiento del extracto en columna abierta, sometiéndolo a solventes con diferentes polaridades. El seguimiento del comportamiento de las fracciones se realiza por cromatografía en capa fina (CCF), y de acuerdo a los resultados, las fraciones se someterán a refraccionamiento en columna abierta eluyendo con mezclas de disolventes hasta la obtención de compuestos puros. Por último, se realizará la actividad citotóxica de extractos, fracciones y compuestos. La especie S. stylare fue asignado el número de herbario 038625. Las hojas colectadas se secaron a 40°C, posteriormente se molieron, y se obtuvo un peso de 551,9g, luego se maceraron usando un sistema etanol:agua (7:3), para obtener el extracto hidroetanólico, el extracto etanólico seco pesó 145,9g con un rendimiento del 26,4%. La separación de los compuestos presentes en el extracto se lleva a cabo empleando cromatografía en columna abierta en donde se sometieron 15,7g del extracto. Las fracciones obtenidas se les realiza seguimiento por CCF, con lo cual se puede determinar que fracciones se encuentran homogéneas para reunirlas, refraccionar y realizar la separación de los compuestos presentes en las fracciones menos complejas. De las fracciones obtenidas se ha podido sugerir la presencia de metabolitos secundarios como terpenos y compuestos con alta conjugación electrónica, los cuales pueden ser cumarinas, lignanos, entre otros.



CORRECCIÓN ORGANOLÉPTICA DE UNA EMULSIÓN COSMÉTICA DE ACEITE DE AGUACATE BAJO LOS PARÁMETROS DE "PRODUCTO NATURAL", MEDIANTE LA MICROENCAPSULACIÓN DE UN ACEITE ESENCIAL Y SU USO COMO AGENTE CORRECTOR

Michael A. Güiza Suárez^a, Jorge A. Martínez^b, Yolima Baena Aristizábal^{a*}.

^a Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Facultad de Ciencias, Departamento de Farmacia, Grupo de Investigación en Tecnología de Productos Naturales (TECPRONA), carrera ³⁰ No. ⁴⁵-⁰³, Bogotá, D. C. (¹¹¹³¹¹), Colombia ^b Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Facultad de Ciencias, Departamento de Farmacia, Grupo de Investigación Aseguramiento de la Calidad, carrera ³⁰ No. ⁴⁵-⁰³, Bogotá, D. C. (¹¹¹³¹¹), Colombia *Autor de correspondencia: ybaenaa@unal.edu.co

Palabras Claves: Producto natural; microencapsulación; secado por aspersión; aceites esenciales; evaluación sensorial.

Buscando corregir organolépticamente una emulsión capilar de aguacate para uso cosmético, bajo estándares de producto natural, se plantea la utilización de aceites esenciales de citronela y romero como agentes correctores de olor, también una metodología para protegerlos considerando su elevada volatilidad y susceptibilidad a la oxidación. Se evaluó la compatibilidad de los aceites con los componentes del preparado cosmético, asegurando que la inclusión de estos ingredientes no afecte la estabilidad del producto; considerando la variación de propiedades como apariencia, viscosidad y tamaño de gota de las emulsiones con aceites esenciales como ingrediente corrector tras la exposición a ciclos de choques térmicos; se empleó como metodología de protección microencapsulación mediante secado por aspersión empleando goma arábiga, maltodextrina y/o almidón modificado de ñame como materiales de pared, evaluando en los microencapsulados obtenidos el rendimiento, eficiencia, capacidad de carga de la microencapsulación, tamaño de partícula, densidad, perfil de liberación y humectabilidad; para elegir aquel con mejores cualidades e incorporarlo a la emulsión capilar. Finalmente, se evaluó la percepción de la corrección realizada mediante un panel de voluntarios, quienes calificaron de acuerdo con su nivel de agrado el olor del preparado cosmético e intención de uso. Los análisis comprobaron la compatibilidad de los aceites esenciales con los componentes de la formulación, haciéndolos aptos para el fin propuesto. La caracterización realizada a los microencapsulados evidencia que las matrices compuestas por goma:maltodextrina y goma:maltodextrina:almidón (proporciones iguales), presentan rendimientos y eficiencias mayores, también humectabilidad y aporte de aceite al medio adecuados para su inclusión en la emulsión inicial. Se acepta el uso de aceites esenciales de citronela y romero como factores correctores de olor en un cosmético de aceite de aguacate, donde la fragancia de los aceites esenciales se sobrepone resultando en un aroma agradable para el consumidor.

BÚSQUEDA DE METABOLITOS SECUNDARIOS EN FRACCIONES POLARES DEL EXTRACTO TOTAL DE *JUSTICIA SECUNDA VAHL* (ACANTHACEAE)

Alejandro Parra Álvarez a*, Eunice Ríos a, Paula A. Charry a.

^a Grupo Químico de Investigación y Desarrollo Ambiental – QIDEA, Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas y Tecnologías, Universidad del Quindío, Armenia, Colombia.

*Autor de correspondencia: aparraa@uqvirtual.edu.co

Palabras Claves: Acanthaceae; Justicias secunda; Aceite esencial; Flavonoides; Cromatografía.

La familia Acanthaceae, comprende casi 250 géneros con más de 2500 especies. Sus especies están muy extendidas en las regiones tropicales del mundo y están poco presentes en las regiones templadas. Las plantas de esta familia son predominantemente hierbas o pequeños arbustos. *Justicia* es el género más grande de Acanthaceae, con aproximadamente 600 especies, las cuales se describen como hierbas perennes erectas. *Justicia secunda* Vahl, es una planta herbácea tropical originaria de América del Sur y el estudio de la composición fitoquímica de sus partes aéreas ha revelado la presencia de metabolitos secundarios, entre ellos polifenoles como flavonoides, quinonas, taninos y antocianinas.

El propósito del estudio fue llevar a cabo purificaciones de las fracciones más polares obtenidas en el fraccionamiento primario del extracto total (CH₂Cl₂-MeOH) de las partes aéreas de la especie en estudio. La colecta se realizó en el Municipio de Calarcá, Departamento del Quindío, un ejemplar ingresó al herbario de la Universidad del Quindío (HUQ 38328). En investigaciones realizadas anteriormente por el grupo se aisló de las fracciones menos polares Lupeol (2), β-sitosterol (3), Estigmasterol (4), β-D-glucopiranósido de estigmasterilo (5) (ver figura). En las fracciones recién estudiadas se encontró Acetil de β-amirina (1). De fracciones más polares se han obtenido 2 sólidos que se encuentran en proceso de elucidación. Adicional se obtuvo el aceite esencial (AE) por hidrodestilacion (HD), el análisis por CG-EM mostró la presencia de alcoholes, ésteres, cetonas y ácidos. Un análisis por espectroscopia de infrarrojo permite inferir hasta el momento la presencia de flavonoides. Adicional, se realizó la extracción del AE por HD en microondas y acoplada a Clevenger, esto con el fin de comparar con la HD sencilla utilizada anteriormente. El AE está en proceso de análisis. Cabe anotar que debido a la poca cantidad que se tiene de las fracciones, se dio inicio a un nuevo fraccionamiento con el ánimo de enriquecer las fracciones más polares y continuar la búsqueda de los metabolitos quimiotaxonómicos de ésta especie.

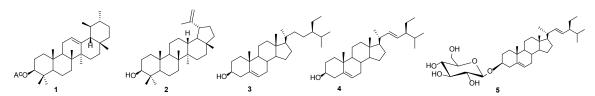


Figura 1. Compuestos aislados de *Justicia secunda* Vahl



SÍNTESIS *ONE-POT* Y EVALUACIÓN *IN SÍLICO* DE AMIDAS DERIVADAS DE 5-AMINOPIRAZOLES COMO POTENCIALES AGENTES ANTI-*TOXOPLASMA GONDII*

Luis E. Giraldo López a, Fernando Cuenú a, Edwar Cortés González a*.

^a Grupo de investigación de Organometálicos y Catálisis (GICOC), Programa de Química, Universidad del Quindío,

Carrera ¹⁵, Calle ¹² Norte, Armenia-Quindío

* Autor de correspondencia: ecortes@uniquindio.edu.co

Palabras Claves: One-pot; química verde; amidas.

Las amidas sintetizadas de compuestos pirazólicos como núcleo en unión con compuestos organofluorados presentan una amplia gama de actividades biológicas, siendo de gran importancia en síntesis de medicamentos debido a la estabilidad que presentan y parámetros de lipofilicidad, por tanto, estas amidas pueden tener una gran actividad biológica en el tratamiento de enfermedades parasitarias principalmente en el tratamiento de la toxoplasmosis por su capacidad de inhibir enzimas quinasas, la toxoplasmosis es causada por el parasito oportunista protozoario toxoplasma gondii. En este trabajo se presenta el diseño, caracterización por técnicas espectroscópicas, la síntesis de amidas derivadas de 5-aminopirazoles y ácido cinámico mediante reacciones one-pot aplicando la química verde, además de la evaluación in sílico de las propiedades ADMET (absorción, distribución, metabolismo, excreción y toxicidad) de los productos obtenidos. Teniendo en cuenta parámetros de lipofilicidad, solubilidad en agua y absorción gastrointestinal, así mismo como su capacidad inhibidora de quinasas y su biodisponibilidad siendo está dependiendo de la solubilidad. Se encontró que la síntesis de amidas por el método *one-pot* es una metodología innovadora que permite la síntesis a temperatura ambiente sin condiciones fuertes, a tiempos cortos y con porcentajes de rendimiento altos que varían entre 65%-87% siendo un procedimiento eficaz en cuanto a las propiedades ADMET encontró que para la amida N-(5-(tert-butil)-1H-pirazol-3-yl)-2,3,4-trifluorobenzamida presenta una gran absorción gastrointestinal, una lipofilicidad menos a 5 y una actividad inhibidora de quinasas sin violar las reglas de Lipinski convirtiéndolo en un posible agente activo en la inhibición de quinasas, lo que favorecerá la comunidad científica.

IDENTIFICACIÓN DE INHIBIDORES POLIFUNCIONALES DE ENZIMAS GÁSTRICAS USANDO ACOPLAMIENTO MOLECULAR Y SIMILITUD DE INTERACCIONES PLIF

<u>Luis A. Osorio</u> ^a, Laura P. López ^a, Oscar J. Patiño ^a, Juliet A. Prieto ^b, Luis E. Cuca ^a, Fabián H. López ^{a*}.

^a Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia, Colombia

b Departamento de Química, Pontificia Universidad Javeriana, Colombia
*Autor de correspondencia: fhlopezv@unal.edu.co

Palabras Claves: Acoplamiento molecular; similitud estructural; energía de unión; enzimas; inhibición.

En la actualidad existe una íntima relación entre las enfermedades diabetes y obesidad, al grado que se les denomina como una sola, diabesidad. Se reporta que, en los últimos años, 44 % de los casos de diabetes, son atribuibles al sobrepeso o la obesidad. La inhibición de blancos terapéuticos enzimáticos como lipasa pancreática (LP), alfa-glucosidasa (AG) y alfa-amilasa (AA) ha adquirido fuerza dentro de los tratamientos de rutina en la lucha contra enfermedades de tipo metabólico como la diabesidad. Los productos naturales son una fuente potencial de compuestos con actividad inhibitoria sobre estos blancos. En el presente trabajo se realizó un cribado virtual por acoplamiento molecular en los sitios catalíticos de las enzimas LP, AG y AA con una base de datos de productos naturales creada a partir de productos naturales comerciales depositados en la base de datos Zinc15. Se utilizaron dos programas de acoplamiento (AutoDock 4.2 y AutoDock Vina 1.1.2). Los compuestos con potencial de inhibición polifuncional sobre los blancos moleculares se seleccionaron por medio de un método de consenso, luego se realizó un análisis de PLIF (Protein Ligand Interaction Fingerprints) teniendo como referencia a los ligandos cristalográficos, encontrándose que aquellos con posible actividad además de tener energías de unión superiores a los ligandos de referencia comparten interacciones intermoleculares que estabilizan la formación de los correspondientes complejos enzima ligando, lo cual aumenta el interés en continuar investigando en este campo.



NUEVAS 4-TIAZOLIDINONAS COMO POSIBLES INHIBIDORES DE LA PROTEÍNA MURB DE *PORPHYROMONAS GINGIVALIS*, UN ESTUDIO *IN SILICO*

Sánchez M. Cristian A. a*, Cortes G. Edwar b, Rocha-Roa Cristian c.

a Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad del Quindío, Colombia
 b Grupo Síntesis de compuestos orgánicos potencialmente bioactivos, Universidad del Quindío, Colombia
 c Grupo de parasitología molecular (GEPAMOL), Centro de investigaciones Biomédicas, Universidad del Quindío,
 Colombia

* Autor de correspondencia: casanchezm@uqvirtual.edu.co

Palabras Claves: Periodontitis; MurB; porphyromonas gingivalis; 4-tialozidinonas.

La periodontitis es una infección grave periodontal de las encías, producida principalmente por la mala higiene bucal, el tabaquismo, el consumo de alcohol, entre otros factores. Las enfermedades periodontales presentan lesiones en tejidos que rodean y sostienen los dientes, inicialmente se presente como gingivitis y en una fase avanzada como periodontitis. Según la OMS luego de las caries, las infecciones periodontales son las enfermedades bucales de mayor presencia en la población mundial, las cuales van avanzando con severidad en cuanto avanza la edad de la persona. En Colombia, un 61.8% de la población presenta periodontitis en diferentes grados de severidad, en los cuales se presenta 7.72% de periodontitis leve, 43.46% moderada y un 10.62% en fase avanzada; a esto se debe sumar la fármaco-resistencia adquirida por los microorganismos bucales. Teniendo en cuenta que 1) Porphyromonas gingivalis es la bacteria principal en los procesos periodontopatógenos y 2) ésta bacteria Gram negativa tiene un componente vital en su pared celular, como el peptidoglucano; éste es biosintetizado por una proteína llamada MurB, la cual no presenta homólogos en organismos eucariotas, se seleccionó la proteína MurB de P. gingivalis con el objetivo de iniciar un estudio computacional basado en la búsqueda de nuevos compuestos tiazolidinonas con potencial terapéutico. Para iniciar, usando las herramientas SwissModel, Molprobity y ProSA se obtuvo y validó la estructura 3D de la proteína PgMurB; con las herramientas Prosite y Conserved Domains se identificaron regiones funcionales e importantes en la proteína PgMurB. Usando el servidor Frog2 se obtuvieron las estructuras 3D de 81 derivados tiazolidinona. Se realizaron una serie de filtros con el fin de obtener compuestos con las mejores características para ser evaluados mediante ensayos de acoplamientos molecular y posibles evaluaciones in vitro; los filtros consistieron en predicción de solubilidad, cumplimiento de las reglas de Lipinski y predicción de riesgos toxicológicos (efecto cancerígeno, hepatotóxico, mutagénico, inmunotóxico y citotóxico) para esto se usaron las herramientas Swissadme y Protox II. Finalmente, mediante simulaciones de acoplamiento molecular usando los programas Autodock Tools y Autodock Vina nosotros postulamos nuestros mejores 3 compuestos para ser evaluados en ensayos in vitro sobre P. gingivalis.

IDENTIFICACIÓN DE POTENCIALES INHIBIDORES POLIFUNCIONALES DE ENZIMAS GÁSTRICAS USANDO ACOPLAMIENTO MOLECULAR Y HUELLAS DIGITALES DE INTERACCIÓN LIGANDO-PROTEÍNA

Luis A. Osorio a, Laura P. López a, Oscar J. Patiño a, Juliet A. Prieto b, Luis E. Cuca a, Fabián López-Vallejo a*. ^a Departamento de Ouímica, Universidad Nacional de Colombia, Colombia ^b Departamento de Química, Pontificia Universidad Javeriana, Colombia * Autor de correspondencia: fhlopezv@unal.edu.co

Palabras Claves: Acoplamiento molecular; similitud estructural; energía de unión; enzimas; inhibición.

En la actualidad existe una íntima relación entre la diabetes y obesidad, al grado que se les denomina como una sola, diabesidad. Se reporta que, en los últimos años, 44 % de los casos de diabetes son atribuibles al sobrepeso o la obesidad. La inhibición de blancos terapéuticos enzimáticos como lipasa pancreática (LP), alfa-glucosidasa (AG) y alfa-amilasa (AA) ha adquirido fuerza dentro de los tratamientos de rutina en la lucha contra enfermedades de tipo metabólico como la diabesidad. Los productos naturales son una fuente potencial de compuestos con actividad inhibitoria sobre estos blancos. En el presente trabajo se realizó un cribado virtual por acoplamiento molecular en los sitios catalíticos de las enzimas LP, AG y AA con una base de datos de productos naturales creada a partir de productos naturales comerciales depositados en la base de datos Zinc15. Se utilizaron dos programas de acoplamiento molecular (AutoDock 4.2 y AutoDock Vina 1.1.2). Los compuestos con potencial de inhibición polifuncional sobre los blancos moleculares se seleccionaron por medio de un método de consenso y un análisis de huellas digitales de interacción ligando-proteina (Protein Ligand Interaction Fingerprints, PLIF) teniendo como referencia a los ligandos cristalográficos, encontrándose que aquellos con posible actividad además de tener energías de unión superiores a los ligandos de referencia comparten interacciones intermoleculares que estabilizan la formación de los correspondientes complejos enzima ligando, lo cual aumenta el interés en continuar investigando en este campo.



EVALUACIÓN DEL EFECTO SINÉRGICO DE NANOEMULSIONES DE LIMONENO Y NANOPARTÍCULAS DE PLATA COMO ALTERNATIVA CONTRA BACTERIAS RESISTENTES

Julián Echeverry a,b, Andrea Naranjo a, Luisa F. Gómez c, Pedronel Araque a*.

a Grupo de Investigación e Innovación en Formulaciones Químicas, Universidad EIA, Colombia
b Laboratorio Clínico Hematológico. Medellín, Colombia
c Grupo de Micología Médica, Facultad de Medicina, Universidad de Antioquia, Colombia
* Autor de correspondencia: pedronel.araque@eia.edu.co

Palabras Claves: Nanopartículas; plata metálica; limoneno; actividad antimicrobiana; bacterias resistentes.

La resistencia bacteriana se convierte en un problema de salud pública en el que las infecciones causadas por bacterias resistentes a múltiples fármacos conducen no solo a los altos costos en tratamientos, si no en el fracaso terapéutico y la posiblemente la muerte. En búsqueda de una alternativa antimicrobiana, en el presente trabajo se propone la caracterización y evaluación de una formulación combinada de nanoemulsiones de limoneno, nanoparticulas de plata por síntesis in situ. Las formulaciones fueron caracterizadas respecto al tamaño de partícula por difracción laser, potencial zeta y estabilidad coloidal óptica utilizando Multiscan 20 por un periodo de 24 horas a 37 °C, también fueron evaluadas in vitro sobre las bacterias Escherichia coli ATCC 25922, Staphylococcus aureus ATCC 29213, Klebsiella oxvtoca ATCC 700324, Escherichia coli productora de Betalactamasas de espectro extendido-BLEE (aislada de una muestra de orina y suministrada por el Laboratorio Clínico Hematológico). Las formulaciones fueron estables a una concentración de limoneno del 3,93 %; iones plata al 0,0016%; Coadyuvante no iónico al 24% y ácido ascórbico al 5,88%, cómo sistema regulador se utilizó ácido cítrico/citrato (1:1) 0,48M para un pH de 4,5. La formulación se clasificó como un sistema polidisperso (PD = 0,0851), con un potencial zeta de -11,6 mV y tamaño promedio de partícula de 81,5 nm \pm 0,9 nm (con un D10 \leq 60,5 nm \pm 0,5 nm; D50 \leq 75,1 nm \pm 0,8 nm y D90 ≤ 107,8 nm ± 2,4 nm). Durante las 24 horas de análisis de estabilidad coloidal se evidenció una velocidad de migración -0.199 ± 0.006 mm/h, un perfil de transmisión constante, y un perfil de retrodispersión con variaciones del 10%, lo que representa una formulación estable a la sedimentación. La concentración mínima inhibitoria (CMI) de la formulación combinada para limoneno y plata fue de 0,12 % y 5x10⁻⁵ % respectivamente. La actividad antimicrobiana de las formulaciones se atribuye a la sinergia entre las nanopartículas de plata y las nanoemulsiones, dado que las formulaciones por separado no presentaron actividad antimicrobiana es importante evaluar la estabilidad microbiológica y otros microorganismos de potencial resistencia antimicrobiana.

SÍNTESIS Y EVALUACIÓN DE PROPIEDADES ÓPTICAS Y ELECTRÓNICAS DEL DERIVADO INDOL-ACRILONITRILO PARA APLICACIÓN EN MATERIALES EMISORES

Jhon S. Oviedo a, Edwar Cortes González a*, Fernando Cuenú Cabezas a.

^a Grupo de Investigación en Compuestos Organometálicos y Catálisis, Universidad del Ouindío, Colombia. *Autor de correspondencia: ecortes@uniquindio.edu.co

Palabras Claves: Reacción Knoevenagel; 3-quinolinacarbaldehido; banda de energía prohibida; voltamétria cíclica; estabilidad termodinámica.

En los ultimo años, la electroquimiluminiscencia (EQL) ha sido de gran interés para la investigación científica debido a su aplicación en dispositivos electrónicos. Los diodos de puntos cuánticos de emisión de luz (QLED) y compuestos orgánicos o organometálicos de emisión de luz (OLED) están reemplazando a los dispositivos actuales (diodos de emisión de luz (LED), diodos de cristal líquido (LCD), entre otros) debido a su bajo voltaje, buen brillo, poder de eficiencia y alta resolución. Sin embargo, los emisores actualmente usados para estos nuevos displays son basados en complejos de Iridio y compuestos con gran cantidad de pasos para su obtención, además, de presentar problemas como efecto Quenching, baja eficiencia cuántica externa (EOE), termolabilidad y activación morfológica. Los núcleos quinolinas se han estado utilizando como posibles materiales emisores debido a su conjugación electrónica y propiedades luminiscentes. Por lo tanto, en este trabajo se sintetizaron nuevos derivados 3-(2-oxo-1,2-dihidroquinolin-3-il)-2-(1H-indol-3-carbonil)acrilonitrilo utilizando como precursores 3-(1H-indol-3-il)-3-oxopropanonitrilo y **3-quinolinecarboxaldehído**. Los métodos de síntesis utilizados para estos derivados fueron convencional, asistido por microondas y ultrasonido con porcentajes de rendimiento de alrededor 80-90% y con coloraciones de amarillo claro a rojo. Los compuestos obtenidos fueron caracterizados por ¹H-RMN, ¹³C-RMN, análisis elemental y espectrometría de masas. Se observó que la mayoría de los compuestos presentaron propiedades luminiscentes en solución y en estado sólido. Por lo tanto, las características de absorción y emisión fueron medidas y las transiciones π - π * y n- π * obtenidas se asociaron al grupo quinolina, indol y carbonilo. Por otra parte, las propiedades electrónicas como la banda de energía prohibida y la reversibilidad fueron evaluadas. El Band gap para los compuestos mostraron resultados de 2,64-3,4 eV, siendo estimados a través de los niveles de energía LUMO y HOMO usando Voltamétria cíclica, UV y fluorescencia. Estos resultados se compararon con cálculos teóricos usando DFT y se obtuvieron errores de 1-2%. La reversibilidad de los compuestos se determinará por Voltamétria cíclica. Por último, el análisis estructural por DSC de los compuestos mostraron estabilidad termodinámica. De lo anterior, las características electrónicas y ópticas de los compuestos obtenidos son aceptables como alternativa para materiales emisores.



SÍNTESIS DE N-ALCOXI-METIL-AMINAS CON AMINAS DERIVADAS DE BENCIDINA MEDIANTE REACCIÓN TIPO MANNICH CON ALCOHOLES

Alejandro Martínez-Manjarrés a, Rodolfo Quevedo a*.

^a Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia

Carrera ³⁰ No. ⁴⁵–⁰³, Bogotá, Colombia

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

Palabras Claves: Mannich; formaldehído; N-alcoxi-metil-aminas; bencidina.

La reacción de Mannich es una reacción tricomponente que involucra la combinación de formaldehído con compuestos nitrogenados (amoniaco, aminas primarias o secundarias) para generar iones iminio intermediarios que posteriormente reaccionan sobre los hidrógenos activos en la posición alfa de compuestos carbonílicos. Cuando el compuesto que posee estos hidrógenos es un fenol o un indol se hace referencia a una reacción tipo Mannich aromática (**esquema 1**), las aplicaciones de esta reacción van desde la síntesis de compuestos naturales y hasta el desarrollo de fármacos.

En este trabajo se presenta el análisis estructural y mecanistico de una nueva reacción tipo Mannich entre aminas aromáticas (bencidina y o-dianisidina) con formaldehído y etanol. Los resultados muestran que bajo las condiciones experimentales empleadas no se obtienen los productos esperados de una reacción de aminas aromáticas frente a formaldehido [3], sino que se forman compuestos lineales (1,2 y 3) conocidos como N-alcoxi-metil-aminas los cuales son productos de una condensación tipo Mannich en la que el alcohol utilizado como disolvente se comporta como nucleófilo (esquema 2).





ULVÖESPINELAS DE TIFE $_2O_4$ Y ZNFE $_2O_4$ OBTENIDAS A PARTIR DE ABLACIÓN LÁSER CON APLICACIONES EN SALUD AMBIENTAL

Brayan S. Moreno Madrigal a, Henry Riascos b, Johan S. Duque b, Yenny. P Ávila c*.

^a Coordinación y Organometálica Aplicada a Materiales Moleculares, Universidad Tecnológica de Pereira, A.A. ⁰⁹⁷,

Pereira 660003, Colombia.

b Plasma, Láser y Aplicaciones, Universidad Tecnológica de Pereira, A.A. ⁰⁹⁷, Pereira ⁶⁶⁰⁰⁰³, Colombia
 c QUIBIO, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad Santiago de Cali, Pampalinda, Santiago de Cali, Colombia
 *Autor de correspondencia: yennytorres@usc.edu.co

Palabras Claves: Ablación laser; nanomateriales compuestos; aplicaciones ambientales.

En los últimos años con el desarrollo de materiales a escala nanométrica, se ha estudiado su aplicación en un gran número de problemáticas que afectan al ser humano y su entorno, mostrando resultados favorables en procesos tales como: catálisis, biosensores, procesos de la industria textil, cosmética y biomedicina. En este contexto este trabajo llevó a cabo el análisis espectroscópico de nanopartículas de TiFe2O4 y ZnFe2O4, en relación al tamaño de partícula y el plasmón asociado. Posteriormente se llevó a cabo el análisis preliminar efecto sobre dos aplicaciones ambientales: la primera como superficies autolimpiantes depositando las nanopartículas sobre polietileno y en segundo lugar como sistema de fotocatálisis inducido a la remoción de HgCl2. En la síntesis de nanoparticulas en solución utilizando el método de ablación láser usando como solventes. Acetona, etanol y agua. El láser pulsado Nd: YAG fue operado a una longitud de onda fundamental de 1064 nm y su armónico de 532 nm, con 10 Hz y 20 Hz de frecuencia de repetición, 7 ns y, 50 mJ de pulsos de láser.

Los coloides fueron caracterizados por UV-Vis, espectroscopia infrarroja (FTIR) y Espectroscopia de absorción atómica (A.A) y las propiedades estructurales fueron caracterizadas mediante microscopia de barrido electrónico (SEM) al depositarse sobre polietileno como sustrato. Los resultados de UV-Vis revelan que las oscilaciones características de las nanopartículas a 270 nm - 330 nm y 460 nm, muestran una fuerte dependencia de los parámetros del láser, el solvente y la energía en función. Dentro de las aplicaciones de forma preliminar las ulvöespinelas de zinc y de hierro presentan importantes características antimicrobianas fotoinducidas con UV- 300 por 24 h frente a *Staphilococcus aereus* y *Eschericia coli*. Se exploran actualmente los mecanismos de desinfección y las mejores condiciones antimicrobianas. Por otro lado, se evalúo la remoción de HgCl2 a partir de la dispersión de ulvöespinelas en agar nutritivo con un porcentaje del 28% a partir de la cuantificación con absorción atómica.

FOTODEGRADACIÓN DE ETILENGLICOL EN AGUAS RESIDUALES A TRAVÉS DEL SISTEMA HETEROGÉNEO FOTO – FENTON

Eliana Berrío M. a, Luis A. Ortiz F. b, Alba N. Ardila A. a*, Erasmo Arriola V. a, Rolando Barrera Z. c.

^{a.} Grupo de Investigación en Catálisis Ambiental y Energías Renovables (CAMER), Politécnico Colombiano Jaime Isaza Cadavid, Colombia

^b Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico en Electroquímica (Cideteq), México

^c Grupo de investigación CERES, Universidad de Antioquia, Colombia

* Autor de correspondencia: anardila@elpoli.edu.co

Palabras Claves: Etilenglicol; sistema foto-fenton heterogéneo; Fe/TiO₂.

El etilenglicol (EG) se usa ampliamente como disolventes en la industria de pinturas y plásticos, y como agente anticongelante en sistemas de refrigeración. Así se han encontrado concentraciones de esta sustancia entre 25-250 g/L en aguas residuales industriales. Los sistemas heterogéneos de foto-Fenton representan una alternativa para degradación de EG, principalmente por razones ambientales y económicas. En este estudio se evaluó la actividad fotocatalítica de materiales Fe/TiO₂ sintetizados por diferentes métodos en la degradación de etilenglicol.

Los fotocatalizadores se prepararon por impregnación húmeda incipiente y sol-gel, se caracterizaron por BET, UV-vis, DRX y XPS. Las pruebas fotocatalíticas se desarrollaron en reactores de vidrio usando 1000 mg/L de EG y 750 mg/L de fotocatalizador bajo irradiación artificial UV por 3 horas a temperatura y velocidad constantes. Se evaluó el efecto del pH y la [H₂O₂]_{inicial}).

Se alcanzaron conversiones considerablemente menores ($\leq 23\%$ para el TiO₂-DP25 y $\leq 25\%$ para el TiO₂-sol-gel), incluso a mayores dosis de H₂O₂, utilizando materiales no dopados, por lo que se necesitó la presencia de Fe para lograr % de degradación de EG significativos, mostrando un efecto positivo de la presencia de Fe como metal dopante en fotocatalizadores 3%Fe/TiO₂. La mayor actividad se obtuvo con el material 3%Fe/TiO₂-sol-gel con 1000 mg/L de H₂O₂ a un pH inicial de 3.0. Los resultados de la caracterización UV-vis, DRX y XPS de los materiales son coherentes con las diferencias en la actividad fotocatalítica observada. Esto puede explicar por qué el material 3%Fe/TiO₂/sol-gel mostró una fotoactividad más alta para la degradación de EG en comparación con el fotocatalizador 3% Fe-TiO₂-DP25, lo que también puede demostrarse por su menor energía de banda prohibida. Es posible degradar etilenglicol en un sistema heterogéneo de foto-Fenton, considerando las ventajas ambientales, con respecto a los sistemas catalíticos homogéneos.



SÍNTESIS DE UN COMPLEJO DE ENALAPRILO CON NÍQUEL Y SU ESTUDIO DE SOLUBILIDAD EN MEDIO ACUOSO

Lizeth Pabón G. a, Robert A. Toro H. a, José A. Henao a*.

a Grupo de Investigación en Química Estructural (GIQUE), Escuela de Química, Facultad de Ciencias, Universidad
Industrial de Santander. Colombia.

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

Palabras Claves: Metalofármacos; enalaprilo; difracción de rayos X; solubilidad.

Los complejos metálicos de coordinación tienen gran importancia en la industria farmacéutica, debido a que son una alternativa para modificar las propiedades fisicoquímicas y biológicas de un principio farmacéutico activo (IFA) permitiendo de esta manera perfeccionar y desarrollar nuevos materiales. Los metalofármacos surgen de la unión de una molécula orgánica (IFA) y un metal. De esta manera, una alternativa para mejorar la acción de los fármacos antihipertensivos es mediante la formación de complejos metálicos de coordinación de níquel. El enalapril (figura 1) es un fármaco que se emplea para controlar la presión arterial elevada e insuficiencias cardiacas; actúa como prodroga del enalaprilato diácido, que es la forma activa, pero es poco absorbido oralmente. Es por este motivo que este principio activo se comercializa en la forma de la sal maleato. En las bases de datos *CSD* y *PDF-4/Organics* se encuentra el reporte de un estudio de complejos de enalapril coordinados con el Zn⁺², pero no se encuentran reportes de estudios de complejación con niquel. En este trabajo se mostrará el estudio de los complejos de niquel empleando los métodos espectroscópicos ultravioleta visible (UV-Vis) e infrarroja (IR), analisis térmicos TGA-DSC y las tecnicas de difraccion de rayos-X.

Figura 1. Diagrama estructural del enalaprilo.

Agradecimientos: Los autores agradecen a la Vicerrectoría de Investigación y Extensión, y al Laboratorio de Rayos X, UIS-PTG, de la Universidad Industrial de Santander (UIS) Bucaramanga, Colombia, por el registro de los datos de difracción.

SUPERFICIES ANTIMICROBIANAS DE HALUROS METÁLICOS INMOVILIZADOS SOBRE MATERIALES POLIMÉRICOS

John Alexander- Vergara a, Carolina Caicedo b, Yenny Ávila-Torres c*.

^a Grupo QCOAMMSB. Programa de Química Industrial. Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.

^b Centro de Investigación en Química Aplicada. Saltillo, Cuahuila, México. ^c Grupo QUIBIO, Facultad de Ciencia Básicas, Universidad Santiago de Cali, Cali, Colombia. *Autor de correspondencia: yennytorres@usc.edu.co

Palabras Claves: Quitosano; membranas; haluros metálicos; propiedades antimicrobianas; electrohilado.

El quitosano(O) es uno de los polímeros naturales más utilizados en investigación, esto debido a sus propiedades antimicrobianas y biodegradabilidad. Se ha demostrado que uno de los mecanismos de acción es aquel donde se pone de manifiesto que el Q compleja oligoelementos y metales traza, que son esenciales para el crecimiento bacteriano lo que lleva a posterior desestabilización y homeostasis; este mecanismo es importante basándose en la formación de enlaces de coordinación entre metales traza y el Q para formación de nuevos materiales bactericidas. Por otro lado, los cationes como los ácidos blandos Ag⁺, Au⁺, Cu⁺, Cu²⁺, Zn²⁺ forman enlaces con tioles o proteínas que contienen grupos azufre, lo que causa oxidación y posterior agotamiento de reservorios de antioxidantes microbianos. En ese sentido, las bacterias Escherichia coli (EC) y Staphylococcus aureus (SA) bacterias abundantes y generadoras de enfermedades de transmisión alimentaria (ETAS), las cuales propician el desarrollo de nuevos sistemas bactericidas que disminuvan su impacto en el sistema de salud. En este proyecto se desarrollaron nuevas películas obtenidas a partir de la técnica de electro-hilado depositadas sobre vidrio erosionado con HF permitiendo ser retiradas del vidrio. Las películas fueron hiladas con la presencia de alcohol polivinílico (PVA) y metales. El PVA mejora la calidad del electro-hilado y a nivel espectroscópico se muestra que hay un desplazamiento a menor energía de los grupos –(NH) y -(OH) en función del incremento del PVA. Las Soluciones preparadas se caracterizaron por espectroscopia UV-Vis e IR. En UV-Vis se observa un efecto electrónico significativo en las transiciones asignadas a $n \rightarrow \pi^*$ y $\pi \rightarrow \pi^*$ (entre 250- 300 nm) del quitosano, con respecto a los compuestos obtenidos, lo cual sugiere una formación de enlaces entre la matriz polimérica y los centros metálicos de Mn (II) y Ag(I). La evaluación antimicrobiana fue realizada sobre SA para las soluciones de partida, sales metálicas y membranas en estado sólido, obtenido resultados significativos tales como: 84.5% de efecto bactericida para sistemas con manganeso en estado sólido y 66.7% para sistemas en estado líquido; por otro lado, bacteriostático para sistemas asociados a AgCl con 84,5%.



EVALUACIÓN DE LAS PROPIEDADES BIOCATALITICAS DE NUEVAS LIPASAS EXTREMÓFILAS INMOVILIZADAS EN OCTILAGAROSA

Mónica I. Ruiz ^a*, Esteban D. Plata ^a, John J. Castillo ^a, Claudia C. Ortiz ^b, Gina P. López ^c, Sandra Baena ^c, Roberto Fernández-Lafuente ^d.

^a Grupo de investigación en Bioquímica y Microbiología (GIBIM), Escuela de química, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

^b Escuela de Microbiología, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia ^cUnidad de Saneamiento y Biotecnología Ambiental (USBA), Departamento de Biología, Pontificia Universidad Javeriana, Bogotá, Colombia

^d Departamento de Biocatálisis - ICP-CSIC. Campus UAM, Madrid, España

* Autor de correspondencia: icmonicaruiz@gmail.com; jcasleon@uis.edu.co

Palabras Claves: Lipasas; biocatálisis; inmovilización; derivados inmovilizados, hiperactivación.

Se evaluó la inmovilización de cinco lipasas en octil agarosa: cuatro nuevas lipasas obtenidas a partir de microorganismos extremófilos (denominadas 499EST, 513EST, 514LIP y 828LIP) y la de *Candida antárctica* B (CALB), mediante determinación de la actividad enzimática relativa en la suspensión y en el sobrenadante, utilizando p-Nitrofenilbutirato (pNPB) como sustrato. Los derivados obtenidos fueron probados en diferentes valores de pH y evaluados en cuando a su estabilidad térmica y su actividad catalítica. Se compararon los resultados obtenidos entre las enzimas solubles y las inmovilizadas, frente a CALB soluble e inmovilizada. Se encontró que el proceso de inmovilización de las lipasas 514, 828 y 513 generó un incremento en la actividad catalítica en un factor de 3, 16 y 20 veces respectivamente, contrario a la lipasa patrón (CALB) y a la lipasa 499 que presentó una disminución de casi un 40% de su actividad inicial. Por otra parte, la inmovilización de la lipasa 499 confirió estabilidad térmica e hiperactivación a la enzima tras 24 horas de incubación a 90°C, ligeramente mayor al 150 y 250 % de la actividad inicial que presentaron las lipasas 828 y 513, respectivamente. En este mismo estudio la lipasa 514 inmovilizada presentó una actividad 10 veces mayor a la enzima soluble, en las mismas condiciones de incubación.

Finalmente, y debido a la inmovilización reversible de las lipasas sobre el soporte de octil-agarosa, estas pudieron ser desorbidas y caracterizadas mediante técnicas electroforéticas, comprobando la purificación de las mismas, asegurando que solo las lipasas se pegaron al soporte hidrofóbico.

USO DE CDS OBTENIDO DE RESIDUOS DE LABORATORIO COMO FOTOCATALIZADOR PARA LA ELIMINACIÓN DE ANTIBIÓTICOS FLUOROOUINOLONAS EN AGUA

Melissa Suárez ^a, Brandon Suarez ^a, Efraím Serna ^b, Ricardo Torres- Palma ^{b*}, Yenny Avila- Torres ^{c*}.

**aGrupo QCOAMMSB, Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira, Colombia
**bGrupo GIRAB, Universidad de Antioquía, Medellín, Colombia
**Grupo QUIBIO, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad Santiago de Cali, Cali, Colombia
**Autor de correspondencia: yennytorres@usc.edu.co; ricardo.torres@udea.edu.co

Palabras Claves: Reutilización de materiales; agua de reúso; semiconductor; transformación.

Fue evaluada la transformación de cuatro antibióticos de la familia de las fluoroquinolonas: levo-floxacina, norfloxacina, ciprofloxaina y ácido nalidixico vía catálisis homogénea, en aguas sintéticas de orina (FU) y hospitalarias (HWW); usando como semiconductor sulfuro de cadmio (CdS). Este material inorgánico CdS se obtuvo a partir de residuos de prácticas ácido-base de Pearson en los laboratorios de química inorgánica y analítica. Para este trabajo, el CdS se purificó y caracterizó mediante el uso de: Espectroscopia electrónica UV-Vis (en estado sólido y solución), espectroscopia Raman, Microscopía electrónica de barrido con EDS y Absorción atómica, obteniendo un $\Delta E_{gap} = 2.6$ eV.

La eficiencia de degradación sigue la siguiente tendencia: LEV > CIP > NAD > NOR. Para LEV, las mejores condiciones fueron: Tiempo (3 horas), pH= 3, concentración CdS= 0.5 g/L y concentración LEV: 5 ppm. El antibiótico LEV no sufre fenómenos de adsorción ni de fotolisis y la ruta de degradación incluye especies reactivas de oxígeno. Con respecto al pH la eficiencia del proceso fue en el siguiente orden: 3 > 5.8 > 7 > 10 mostrando una fuerte dependencia de la forma iónica de LEV, y siendo la forma catiónica del antibiótico más susceptible a oxidarse. El mecanismo de degradación de las especies reactivas de oxígeno ocurre principalmente por la contribución del radical superóxido. El proceso en agua desionizada mostro un efecto interesante: para bajas concentraciones de LEV (6.92 μΜ) se observó una mejora en el proceso de degradación, mientras que a una concentración más alta de LEV (27.68 μΜ), se inhibió la degradación. Adicionalmente, aguas sintéticas de FU y HWWW con LEV fueron tratadas. Para HWW, se obtuvo una remoción del 70% del antibiótico en un periodo de 3 horas. Esto indica que el CdS es una interesante opción para el tratamiento de aguas hospitalarias disminuyendo el impacto ambiental negativo de la entrada de fluoroquinolonas en medios naturales.

Este trabajo es una contribución a la reutilización de desechos en los laboratorios de enseñanza promoviendo la eliminación de antibióticos en aguas residuales.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE DERIVADOS *N-HETEROCICLOS* DE AZO- IMINAS, COORDINACIÓN A RUTENIO Y EVALUACIÓN EN REACCIONES DE ALQUILACIÓN DE METILCETONAS

Alejandra Molina Valencia a, Fernando Cuenu Cabezas b*.

a Grupo de Investigación en Compuestos Organometálicos, Universidad del Quindío, Colombia.
*Autor de correspondencia: amolinav@uqvirtual.edu.co

Palabras Claves: N- Heterociclos; iminas; rutenio; alquilación; catalizadores.

La α-alquilación de cetonas es uno de los métodos fundamentales para la mformación de enlaces C-C. Los compuestos de rutenio tienen una amplia versatilidad en este tipo de reacciones. El objetivo de este trabajo de investigación es realizar la síntesis y caracterización de catalizadores de rutenio, evaluar su actividad en reacciones de alquilación de metilcetonas. Se realizó la síntesis de los derivados pirazólicos de azo iminas (4-((E)-(4-R-phenyl) diazenyl)-2-((E)-(5-tert-butyl-1Hpyrazol-3-ylimino)methyl)phenol y su caracterización por las diferentes técnicas espectroscópicas IR, RMN, DSC, UV-VIS y espectrometría de masas. Los compuestos derivados pirazólicos de azo iminas se coordinaron a rutenio. Se realizaron las reacciones de alquilación de metilcetonas evaluando la actividad y selectividad de los sistemas catalíticos en donde se observó el efecto de la temperatura de reacción (80, 100, 120 °C), efecto de la base (NaOH, KOH, y K₂CO₃), efecto de las relaciones molares. Esto se hizo tomando muestras que se analizaron por cromatografía de masas a las 2, 4, 6 y 12 horas de reacción. Se realizaron los cálculos del porcentaje de conversión, porcentaje de selectividad, TON y TOF. Los complejos en la reacción de alquilación de metilcetonas fueron activos y selectivos y generando como subproducto agua.

SÍNTESIS DE AMINOÉSTERES DERIVADOS DE LA GLICINA Y SUS COMPUESTOS DE COORDINACIÓN CON NÍQUEL(II) Y ZINC(II) CON POSIBLE ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA

Juliana Rincón-López a, Noráh Barba-Behrens b, Margarita Romero-Ávila b, Blas Pérez-Flores b, Yenny P. Ávila-Torres c, Edwin Flórez-López c*.

> ^a Programa de Química Industrial. Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia. ^b Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, México D.F. ⁰⁴⁵¹⁰, México. ^c Grupo OUIBIO, Facultad de Ciencias Básicas. Universidad Santiago de Cali. Pampalinda, Cali, Colombia.

* Autor de correspondencia: edwin.florez00@usc.edu.co

Palabras Claves: Glicina; estere tilico; compuesto de coordinación; ligante; aminación reductiva.

En el presente trabajo se sintetizó el derivado bencílico del éster etílico de la glicina (eegb) mediante una animación reductiva del benzaldehído con el éster etílico de glicina (eeg) en un 50% de rendimiento, posteriormente el compuesto bencilado (eegb) se coordinó a Ni (II). Por otro lado, el éster etílico de la glicina (eeg) se coordinó con Ni (II) y Zn (II). El ligante (eegb) y los compuestos de coordinación obtenidos se caracterizaron por medio de técnicas espectroscópicas y espectrométricas y se determinó el modo de coordinación de los ligantes debido a que por sus diversos átomos donadores de electrones podría funcionar como quelatante, puente o monodentado.

Los análisis obtenidos nos llevaron a concluir que el éster etílico de la glicina (eeg) se coordina de manera quelatante con los dos metales y el éster etílico bencilado de la glicina (eegb) se coordina de manera monodentada con el Ni, comportamiento que está siendo confirmado por medio de un estudio teórico de HSAB en donde se evidencia que al adicionar el grupo bencilo al nitrógeno, la molécula localiza la mayoría de su densidad electrónica sobre este disminuyendo la capacidad de los oxígenos de coordinarse.



AMINOESTERES Y SUS DERIVADOS CON COBRE(II), MANGANESO(II) Y NIQUEL(II) COMO POTENCIALES ANTIMICROBIANOS

Julián Ramírez Rodríguez ^a, Yeferson Granada Vergara ^a, Edwin Flórez López ^b, Yenny Ávila-Torres ^{b*}.

^a Grupo QCOAMMSB. Programa de Química Industrial. Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.

^b Grupo QUIBIO, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad Santiago de Cali, Pampalinda, Santiago de Cali

*Autor de correspondencia: yennytorres@usc.edu.co

Palabras Claves: Compuesto de coordinación; aminoésteres; actividad microbiológica; caracterización; antibióticos.

El incremento de diferentes especies de bacterias patógenas resistente a los antibióticos es un problema de salud pública que no cesa de aumentar de forma alarmante en todo el mundo. Bajo este contexto, en este proyecto de investigación se sintetizaron nuevos compuestos de coordinación con aminoésteres bencilados derivados de los aminoácidos valina y glicina debido a su similitud estructural con antibióticos betalactámicos (figura 1) y los metales de transición de cobre(II), manganeso (II), y níquel (II) aportados por las diferentes sales utilizadas ([CH₃COO]-, Br -, Cl -), con la finalidad de analizar su actividad antimicrobiana contra *Staphylococcus aereus* y *eschericia Coli*.

Figura 1. Estructuras químicas de: a,b) Derivados bencilados de glicina y valina. c) ampicilina

El análisis del IR muestra que algunas bandas características como la del carbonilo (C=O) y la amina (NH) se desplazan a menor energía lo que indica que posiblemente la coordinación se haya dado por alguno de estos grupos funcionales, el análisis UV indica que en el ligante no hay presentan transiciones electrónicas d-d mientras que en los compuestos de coordinación si se logran observar este tipo de transiciones electrónicas que verifican la coordinación al centro metálico.