



LA QUÍMICA COMO CIENCIA INTERDISCIPLINARIA

Memorias del IV Congreso Latinoamericano de Estudiantes de Química y XVI
encuentro de estudiantes de química pura y aplicada,
Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia
(19-21 de Abril de 2017)



Participante del IV Congreso Latinoamericano de Estudiantes de Química y XVI encuentro de estudiantes de química pura y aplicada, los programas de Química Industrial y Tecnología Química de la Escuela de Química de la Universidad Tecnológica de Pereira, así como la Asociación Nacional de Estudiantes (ANEQ), le dan la bienvenida.

El significado nacional e internacional de este evento está soportado en la necesidad que existe actualmente en Latinoamérica en socializar los trabajos de los estudiantes de pregrado y posgrado en las áreas de química y afines. Es para nosotros importante permitir la divulgación de propuestas, avances y trabajos culminados en donde el estudiante pondera sus capacidades, interactúa con pares académicos y es sometido a procesos de evaluación por parte de un comité científico. Este es un evento que se desarrolla cada dos años e implica la realización de un curso de actualización en una temática específica.

En nuestro caso, tendrá una jornada académica entorno a procesos de oxidación avanzados con la conferencia titulada **“Procesos fotocatalíticos sobre TiO_2 y foto-Fenton para la detoxificación y desinfección de agua”**. Encontrará un grupo dinámico de trabajo con estudiantes de Ecuador, Colombia, Chile, México y Argentina y renombrados conferencistas principales en las áreas de química orgánica, química inorgánica, fisicoquímica, química analítica y química ambiental.

El programa para este encuentro involucra 15 conferencias principales, 11 conferencias cortas de estudiantes de posgrado o pregrado culminados y aprobados por el comité científico y 52 carteles impresos de los trabajos seleccionados en esta modalidad. Nosotros estamos apoyados sobre un comité científico de alta calidad y la asistencia técnica y académica de la Universidad Tecnológica de Pereira.

En adición al excelente programa, el estudiante puede interactuar con los conferencistas con sesiones de preguntas programadas, establecer relaciones académicas e intercambios y plantearse nuevos desarrollos bajo un contexto amplio y constructivo.

En este libro de memorias se encuentra el programa del evento, los conferencistas principales y la asignación por áreas de los trabajos seleccionados con sus respectivos resúmenes.

Esperamos su estadía en la ciudad de Pereira del 19-21 de Abril sea de su agrado.

Atentamente,

Dra. Yenny Patricia Avila T
Comité Académico.
Universidad Tecnológica de Pereira.

Andrés Morcillo
Presidente ANEQ

PROGRAMACIÓN DEL EVENTO

Abril 19 de 2017

Hora	Actividad
7:00-8:30 AM	Inscripciones al evento (Entrega de escarapela, memorias)
8:30-9:00 AM	Bienvenida de directivas de la Universidad y presidencia de ANEQ
9:30- 10:15 AM	CURSO PARTE I Dr. Julián Rengifo (Universidad de la Plata- Argentina) <i>“Procesos fotocatalíticos sobre TiO₂ y foto-Fenton para la detoxificación y desinfección de aguas”</i>
10:15-10:30 AM	Café
10:30-12:00	CURSO PARTE II Dr. Julián Rengifo (Universidad de la Plata- Argentina) <i>“Procesos fotocatalíticos sobre TiO₂ y foto-Fenton para la detoxificación y desinfección de aguas”</i>
12:00 – 2:00 PM	ALMUERZO
QUÍMICA ORGÁNICA	
2:00- 2:30 PM	Dr. Octavio Manero (Instituto de Investigaciones en Materiales- UNAM- México) <i>“Flujo de fluidos complejos a través de contracciones y expansiones: Su importancia en el procesamiento de polímeros”</i>
2:30- 3:00 PM	Dr. Edwin Flórez (Universidad Santiago de Cali- Colombia) <i>“Síntesis y caracterización de compuestos orgánicos polifuncionales con actividad biológica”</i>
3:00- 3:30 PM	Dr. Hipólito Isaza (Universidad del Valle- Colombia) <i>“Terpenos y terpenoides de bagaso de caña de Saccharum officinsrum”</i>
3:30- 4:00 PM	Dr. Manuel de Jesus Aguilar (Centro de Investigación Científica de Yucatán A.C- México)

	<i>"Carbonización de membranas poliméricas: un método para lograr mejores factores de separación de gases"</i>
4:00-4:15 PM	Café
4:15 – 4:45 PM	MsC. Francisco Jiménez (Grupo Polifenoles, Universidad Tecnológica de Pereira- Colombia) <i>"Estrategias de caracterización de productos naturales"</i>
4:45- 5:05 PM	Angélica del Pilar Peñarando (Universidad Industrial de Santander- Colombia) <i>"Síntesis de 7-fenil-6H-cromeno [3,4-6] quinolinas promovida por K₂S₂O₅ vía reacción tándem imino Diels- Alder/ oxidación entre anilina y O-anamil salisaldehído"</i>
5:05- 5:25 PM	Marisol López (Universidad de Caldas) <i>"Aplicación de la reacción de Grignard en la síntesis de moléculas fluoradas con potencial farmacológico"</i>
5:25 - 6:00 PM	Evento Cultural

Abril 20 de 2017

Hora	Actividad
QUÍMICA INORGÁNICA	
8:00-8:30 AM	Dra. Norah Barba Behrens (Facultad de Química- UNAM- México) <i>"Compuestos de coordinación con ligantes de relevancia biológica y su gran versatilidad estructural, electrónica y magnética"</i>
8:30- 9:00 AM	Dr. Hoover Valencia (Grupo Fotocatálisis y estado sólido, Universidad Tecnológica de Pereira- Colombia) <i>"Estructura cristalina y catálisis de sistemas de perovskitas laminares de tantalato para la fotólisis de agua"</i>
9:00- 9:30 AM	Sebastián Díaz Serrano (Universidad del Valle- Colombia)

	<i>“Síntesis y caracterización de complejos de Ni(II) y Co(II) soportados en ligando N-heterocíclicos”</i>
9:30- 10:00 AM	Lina Marcela Agudelo Charry (Universidad Santiago de Cali- Colombia) <i>“Síntesis y Caracterización de Nanorecubrimientos de Nitruros de Cobre (Cu₃N) Logrados por la Técnica de Pulverización Catódica, para Aplicaciones en Electrónica Flexible”</i>
10:00- 10:15 AM	Café
10:15-10:45 AM	Elkin Alexis Sánchez (Grupo de Organometálica- Universidad del Quindío- Colombia) <i>“ Síntesis y caracterización de catalizadores de paladio, piridilchalconas y su evaluación en la reacción de acoplamiento C-C entre yodobenceno y estireno en medio acuoso”</i>
10:45-11:15 AM	Jaime Andrés Parra Reyes (Universidad del Cauca- Colombia) <i>“ Adsorción de Cromo y Plomo en Materiales Lignocelulosos”</i>
11:15-11:45 AM	Karoll Ferrer Pertuz (Universidad Tecnica Federico Santa María- Chile) <i>“Diseño y síntesis de nuevos análogos de brasinoesteroides con actividades promotoras del crecimiento vegetal”</i>
12:00 -2:00	Almuerzo
FISICOQUÍMICA	
2:00- 2:30 PM	Dra. Romina Castañeda Arriaga (Universidad Autónoma Metropolitana- México) <i>“Estudio teórico del mecanismo y cinética de las rutas involucradas en la toxicidad del paracetamol y su meta- análogo, a nivel molecular”</i>
2:30- 3:00 PM	Dr. Luis Felipe del Castillo (Instituto de Investigaciones en Materiales- UNAM- México) <i>“Bioenergía y trabajo muscular, termodinámica aplicada”</i>
3:00- 3:30 PM	Dr. Julián Rengifo (Universidad de la Plata- Argentina)

	<i>“¿Puede la adición de H₂O₂ potenciar procesos abióticos naturales foto inducidos para eliminación de contaminantes emergentes y la inactivación de microorganismos en agua?”</i>
3:30- 4:00 PM	Dra. Adriana Pérez-González (Universidad Autónoma Metropolitana- México) <i>“Estudio teórico de la Actividad Antioxidante y Pro-oxidante del ácido 3-Hidroxiantranílico”</i>
4:00-4:15 PM	Café
4:15 – 6:00 PM	Sesión de Poster Áreas de orgánica, Inorgánica, Físicoquímica

Abril 21 de 2017

Hora	Actividad
QUÍMICA ANALÍTICA Y AMBIENTAL	
8:00-8:30 AM	Dr. Drochss Petri Valencia (Universidad Santiago de Cali- Colombia) <i>“Modificación de superficies electródicas con grafeno. Nuevas rutas sintéticas, estrategias y aplicaciones para el análisis químico”</i>
8:30- 9:00 AM	Dr. Alfredo Maciel (Instituto de Investigaciones en Materiales- UNAM- México) <i>“Membranas poliméricas asociadas a residuos agroindustriales”</i>
9:00- 9:30 AM	Ms.c Fernando Areiza (Grupo Coordinación y Organometálica, Universidad Tecnológica de Pereira- Colombia) <i>“Análisis fisicoquímico de compost expuesto a campo magnético estático homogéneo”</i>
9:30- 10:00 AM	Liseth Damaris Barbosa (Universidad Santiago de Cali- Colombia) <i>“Modificación de superficies electródicas con Grafeno para determinación de Capsaicina en parches transdérmicos por métodos electroquímicos”</i>
10:00- 10:15 AM	Café

10:15-10:45 AM	<p>Dra. Carolina Caicedo (ASTIN- Sena- Colombia)</p> <p><i>“Comportamiento Fisicomecánico de Compuestos de Polipropileno y Cargas Minerales con Diferentes Ciclos de Proceso”</i></p>
10:45-11:15 AM	<p>Andrea Carolina Begambre Berrio (Universidad de Córdoba-Colombia)</p> <p><i>“ Evaluación de interferencias por hierro, manganeso y aluminio en la cuantificación de boro en solución mediante el método de absorción molecular”</i></p>
11:15-11:45 AM	<p>Dr. Fabio Zuluaga (Universidad del Valle)</p> <p><i>“Polímeros Biodegradables, Investigaciones en la Universidad del Valle”</i></p>
12:00 – 2:00	Almuerzo
2:00- 2:30 PM	<p>Dr. José Martínez (Universidad Pedagógica y tecnológica de Colombia)</p> <p><i>“Valorización de los residuos agroindustriales lignocelulósicos basados en la plataforma del furano”</i></p>
2:30- 4:00 PM	Sesión de Poster Áreas de Analítica y ambiental
4:00-4:15 PM	Café
4:15 – 4:30 PM	Entrega de premiación (Mejor poster, mejor presentación oral)
4:30- 5:00 PM	Reunión de ANEQ Elección de nueva sede 2019
5:00 -6:00 PM	CLAUSURA Y EVENTO CULTURAL

LA QUÍMICA COMO CIENCIA INTERDISCIPLINARIA
Memorias del IV Congreso Latinoamericano de Estudiantes de Química y XVI
encuentro de estudiantes de química pura y aplicada, Universidad Tecnológica de
Pereira, Colombia

YENNY PATRICIA AVILA TORRES
Coordinador Académico

HOOVER ALBEIRO VALENCIA
Director programa de Química Industrial y Tecnología Química

REINALDO MARÍN
Decano Facultad de tecnologías

RODRIGO LONDOÑO
Director Boletín Ácidos y Bases

ANDRES MORCILLO
Presidente ANEQ

Pereira, 19-21 de Abril de 2017

Comité científico

- Dr. Julián Rengifo** (Universidad de la Plata, Argentina)
Dra. Norah Barba Behrens (Universidad Nacional Autónoma de México, México)
Dr. Octavio Manero (Universidad Nacional Autónoma de México, México)
Dra. Carolina Caicedo (Centro Nacional de Asistencia Técnica a la Industria, Colombia)
Dr. Edwin Flórez (Universidad Santiago de Cali- Colombia)
Ms.C. Fernando Areiza (Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia)
Dr. Hoover Valencia (Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia)
Dr. Manuel de Jesús Aguilar Vega (Centro de Investigación Científica de Yucatán A.C)
Dra. Romina Castañeda (Universidad Autónoma Metropolitana, México)
Dra. Adriana Pérez González (Universidad Autónoma Metropolitana, México)
Dr. Hipólito Isaza (Universidad del Valle, Colombia)
Dr. Fabio Zuluaga (Universidad del Valle, Colombia)
Dra. Yenny Patricia Avila (Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia)
Dra. Paula Osorio (Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia)
MsC. Francisco Jiménez (Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia)
Dr. Alfredo Maciel (Universidad Nacional Autónoma de México, México)
Dr. Luis Felipe del Castillo (Universidad Nacional Autónoma de México, México)
Dr. Drochss Valencia (Universidad Santiago de Cali- Colombia)
Dr. Jimmy Morales (Universidad Santiago de Cali- Colombia)
MsC. Karoll Ferrer Pertuz (Universidad Técnica Federico Santa María- Chile)
Dr. José Martínez (Universidad Tecnológica y Pedagógica de Tunja- Colombia)

Comité organizador

- Dra. Yenny Patricia Ávila Torres** (Comité académico- UTP)
Dra. Paula Osorio (Comité académico- UTP)
Dr. Hoover Albeiro Valencia (Director programa de química industrial y tecnología química-UTP)
Q. Reinaldo Marín (Decano facultad de tecnologías (UTP)
Rodrigo Londoño (Director boletín ácidos y bases UTP)
Yeraldin Serna (Logística)
Jhon Guateque (Logística)
Jheison Restrepo (Estudiante)
Julián Ramírez (Estudiante)
Anne García (Estudiante)
Jeferson Granada (Estudiante)
Melissa Suarez (Estudiante)
Jorge Luis Acosta (Estudiante)
Daniel Ávila (Apoyo Técnico y diseño)

NOTAS BIBLIOGRAFICAS DE CONFERENCISTAS PRINCIPALES

1. **Dr. Octavio Manero.**

Licenciatura y maestría en Ingeniería química (UNAM- México, Doctorado en matemáticas aplicadas (Universidad de Gales, Gran Bretaña), Estancia Posdoctoral (Instituto Tecnológico de California), Docente invitado en las universidades de: Nueva York, Grenoble, Sevilla, Murcia y Bristol. Miembro consultivo del Consejo de Ciencias de la presidencia de la República de México. Investigador del departamento de polímeros (Instituto de Materiales-UNAM). Trabajos en conjunto con PEMEX, Industrias Resistol, Condumex y Grupo Girsá. Destacan sus aportes en la investigación del reciclaje de material para elaborar nanocompuestos poliméricos utilizando arcillas volcánicas o tereftalato de polietileno reciclado (PET). En dicho campo de aplicación colaboró en el desarrollo de nanocompuestos poliméricos para sustituir los soportes de madera que sostienen los rieles del metro de la ciudad de México. Premio Universidad Nacional en el área de Innovación Tecnológica y Diseño Industrial otorgado por la UNAM 2001, Premio Nacional de Química "Andrés Manuel del Río" 2002, Premio Nacional de Ciencias y Artes en el área de Tecnología y diseño 2003. Ha escrito alrededor de 194 artículos científicos, 85 publicaciones en memorias, 7 de divulgación y 6 libros.

2. **Dr. Luis Felipe del Castillo.**

Física (U. Sonora- México), Dr. Ingeniería Química (UNAM). Las líneas de investigación son: Separación de gases en membranas poliméricas con agregados nanoporosos, líquidos iónicos, Polímeros conductores. Estudia diferentes propiedades físicas de soluciones de polímeros como su factor de estructura, su dimensión fractal así como sus procesos de relajación. Profesor IIM- Facultad de Ciencias-Química UNAM.

3. **Dr. Julián Rengifo.**

Químico en la Universidad del Valle, Cali, Colombia. Ph.D en Química (Escuela Politécnica Federal de Lausana en Suiza). Estancia posdoctoral (Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas- CINDECA- Argentina). Líneas de investigación: fotocatalisis heterogénea sobre TiO_2 , síntesis, caracterización y actividad fotocatalítica de materiales basados en TiO_2 con absorción de luz visible y procesos Fenton y foto-Fenton para la detoxificación y desinfección de aguas. Es autor y co-autor de más de 20 publicaciones internacionales y capítulos de libros.

4. **Dra. Norah Barba Behrens.**

Realizó sus estudios de licenciatura en la Facultad de Química de la UNAM. Llevó a cabo sus estudios de doctorado en Química (Inorgánica) en el Imperial College of Science and Technology en Inglaterra. Desde 1979 es profesora/investigadora en la Facultad de Química, miembro del Sistema Nacional de Investigadores. Su labor de docencia e investigación está enfocada a la Química de Coordinación y a la Bioinorgánica. Ha sido profesora invitada y ha impartido conferencias en diversas universidades nacionales e internacionales. Ha dirigido más de cincuenta tesis de licenciatura y posgrado y los resultados de su investigación han sido publicados en revistas internacionales especializadas.

5. Dr. Edwin Flórez.

Químico (U. del Valle), Dr. Química (UNAM), Estancia posdoctoral (UNAM- México). Actual director del programa de Química (Universidad Santiago de Cali). Líneas de investigación: Síntesis orgánica de pirroles y xantatos, síntesis y análisis dinámico de rotores moleculares y estudios de adición-ciclación por radicales. Su labor de docencia e investigación está orientada a la química orgánica.

6. Dr. Alfredo Maciel.

Químico (UNAM), Dr. Química (Inglaterra), Docente de química e ingeniería de materiales (UNAM). Membranas de polímeros biodegradables y no biodegradables, preparadas por la técnica de electrohilado. Entre las membranas de polímeros biodegradables están el poli(ácido láctico), la policaprolactona, mezclas de quitosano/poli(alcohol vinílico).

7. Dr. Drochss Valencia.

Químico de la Universidad Nacional de Colombia, Doctorado en ciencias químicas por el cinvestav, tres postdoctorados (uno en la UAM en ingeniería de los materiales, segundo en electroanalítica en la universidad de Sao Paulo, y un tercer en nuevos materiales y electroquímica en San Luis de Marañao, Brasil) 11 artículos todos en revistas de alto impacto, primer autor en 8 de los mismos, ponencias en más 15 congresos internacionales, Codirigido una tesis de doctorado, profesor en la Universidad de Sao Paulo, Brasil, en la Universidad de Asunción, en Bogotá en la Konrak Lorents, e investigador en la U militar, actualmente profesor de dedicación exclusiva en la USC, áreas de trabajo electroquímica fundamental, nuevos materiales y biosensores.

8. Dr. Hoover Valencia.

Químico (U. del Quindío), Ms.C. Química (U. Valle), Ph.D Química (UNAM). Actual director del programa de Química (Universidad Tecnológica de Pereira), Líneas de investigación en estado sólido, cristalografía y semiconductores.

9. Dra. Adriana Pérez-González.

Licenciatura en Química Industrial en la Universidad Autónoma de Tlaxcala (2009). Estancia en el XVIII Verano de la Investigación Científica por la Academia Mexicana de Ciencias, A. C. en la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo. Doctorado en Ciencias (Química) en la Universidad Autónoma Metropolitana – Unidad Iztapalapa (2013). Título de tesis de Doctorado: “Estudio teórico del Edaravone y sus derivados como agentes químicos para combatir el estrés oxidativo.” Estancia de Investigación Postdoctoral con el tema: “Estudio de reacciones radical-molécula relevantes en la prevención y tratamiento del estrés oxidativo utilizando la química computacional”. Estancia Postdoctoral en la Facultad de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México, con el trabajo de investigación titulado: “Estudio teórico de antioxidantes primarios y secundarios: cinética, mecanismos de acción y actividad relativa”. Estancia de colaboración Posdoctoral en el Departamento de

Química y Tecnología Química, Laboratorio de Química Teórica y Computacional, Universidad de Calabria, Italia. Línea de investigación relacionada con estrés oxidativo, mecanismos de reacción, termodinámica computacional y cinética computacional. En el período 2011-2016 quince artículos en revistas indexadas de alto impacto científico.

10. Dr. Fabio Zuluaga.

Doctorado en Ciencias-Químicas, 1993. Master of Science, University of Manchester-UM, Gran Bretaña 1975. Químico, Universidad del Valle, Colombia 1969. Líneas de investigación: Estudio de la reactividad de alfa, alfa -difluoro-beta -lactonas con nucleófilos y de la reacción de Reformatsky con bromofluoroacetato de etilo, síntesis y caracterización de Polímeros.

11. Dr. Manuel de Jesus Aguilar.

Doctor The University of Texas at Austin, 1993. Maestría. Maestría en Ingeniería Química, University of Southern California, 1984. Licenciatura. Ingeniero Químico, Universidad Autónoma de Zacatecas, México, 1980. Línea Actual de Investigación: El trabajo de investigación está enfocado hacia el entendimiento de procesos de transporte en materiales poliméricos mediante estudios sistemáticos y caracterización de estructuras de polímeros y materiales compuestos para membranas con aplicaciones en separación de gases, vapores y líquidos de interés industrial, y sistemas de polímeros iónicos con aplicación en tratamiento de agua, biocombustibles y procesos de energías limpias.

12. Dra. Carolina Caicedo.

Posdoctorante. Departamento de Fisicoquímica, Facultad de Química. Universidad Nacional Autónoma de México, México D.F. 2009 – 2013 Doctora en Ciencia e Ingeniería de Materiales. Universidad Nacional Autónoma de México, México D.F, Estancia de investigación: Universidad de Barcelona, España. 2007 – 2008 Maestra En Ciencia e Ingeniería de Materiales. Universidad Nacional Autónoma de México, México D.F. 2001 – 2006 Química. Universidad del Quindío, Armenia Quindío, Colombia. 2006 Diplomado en Sistemas de Gestión de Calidad NTC – ISO/IEC 17025. Universidad del Valle, Colombia.

CONFERENCIAS PRINCIPALES

1. Dr. Octavio Manero.

“Flujo de fluidos complejos a través de contracciones y expansiones: Su importancia en el procesamiento de polímeros”.

2. Dr. Luis Felipe del Castillo.

“Bioenergía y trabajo muscular, termodinámica aplicada”.

3. Dr. Julián Rengifo.

“¿Puede la adición de H₂O₂ potenciar procesos abióticos naturales foto inducidos para eliminación de contaminantes emergentes y la inactivación de microorganismos en agua”.

4. Dra. Norah Barba Behrens.

“Compuestos de coordinación con ligantes de relevancia biológica y su gran versatilidad estructural, electrónica y magnética”

5. Dra. Romina Castañeda Arriaga.

“Estudio teórico del mecanismo y cinética de las rutas involucradas en la toxicidad del paracetamol y su meta- análogo, a nivel molecular”

6. Dr. Edwin Flórez.

“Síntesis y caracterización de compuestos orgánicos polifuncionales con actividad biológica”.

7. Dr. Alfredo Maciel.

“Membranas poliméricas asociadas a residuos agroindustriales”.

8. Dr. José Martínez.

“Valorización de los residuos agroindustriales lignocelulósicos basados en la plataforma del furano”

9. Dra. Carolina Caicedo.

“Comportamiento Fisicomecánico de Compuestos de Polipropileno y Cargas Minerales con Diferentes Ciclos de Proceso”.

10. Dr. Drossh Petri Valencia.

“Modificación de superficies electrónicas con grafeno. Nuevas rutas sintéticas, estrategias y aplicaciones para el análisis químico”.

11. Dr. Hoover Valencia.

“Estructura cristalina y catálisis de sistemas de perovskitas laminares de tántalo para la fotólisis de agua”

12. Dra. Adriana Pérez-González.

“Estudio teórico de la Actividad Antioxidante y Pro-oxidante del ácido 3-Hidroxiantranílico”

13. Dr. Fabio Zuluaga.

“Polímeros biodegradables, investigaciones en la universidad del valle”

14. Dr. Manuel de Jesus Aguilar

“Carbonización de membranas poliméricas: un método para lograr mejores factores de separación de gases”

15. MsC. Francisco Jiménez.

“Estrategias de caracterización de productos naturales”

CONFERENCIAS CORTAS DE ESTUDIANTES DE POSGRADO O TRABAJOS SELECCIONADOS

Título de la conferencia	Estudiante	Asesor	Universidad
1. <i>Síntesis de 7-fenil-6H-cromeno [3,4-6] quinolinas promovida por $K_2S_2O_5$ vía reacción tándem imino Diels-Alder/ oxidación entre anilina y O-anamil salisaldehído.</i>	Angélica del Pilar Peñarando	Dr. Vladimir V. Kouznetsov	Universidad Industrial de Santander
2. <i>Aplicación de la reacción de Grignard en la síntesis de moléculas fluoradas con potencial farmacológico.</i>	Marisol López Muñoz Jessica Johanna Gómez	Dr. Rogelio Ocampo, Dra. Luz Amalia Rios.	Universidad de Caldas
3. <i>Evaluación de la actividad citotóxica en células HeLa y evaluación de la catalítica en reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki- Heck en un complejo de Paladio-Aminopirazol.</i>	Natalia Muñoz	Dr. Fernando Coenú Dr. Alejandro Hernández. Dr. Diego Molina	Universidad del Quindío.

4. <i>Modificación de superficies electrónicas con Grafeno para determinación de Capsaicina en parches transdérmicos por métodos electroquímicos</i>	Liseth Damaris Barbosa		Universidad Santiago de Cali
5. <i>Síntesis y Caracterización de Nanorecubrimientos de Nitruros de Cobre (Cu₃N) Logrados por la Técnica de Pulverización Catódica, para Aplicaciones en Electrónica Flexible</i>	Lina Marcela Agudelo Charry	Dr. Franklin Muñoz	Universidad Santiago de Cali

Título de la conferencia	Estudiante	Asesor	Universidad
6. Síntesis y caracterización de catalizadores de Paladio, piridilchalconas, y evaluación en la reacción de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck entre yodobenceno y estireno en medio acuoso.	Elkin Alexis Sánchez Yocuè	Dr. Fernando Coenú	Universidad del Quindío.
7. Análisis fisicoquímico de compost expuesto a campo magnético estático homogéneo	Ms.C Fernando Antonio Areiza	Dr. Alexander Feijoo Martínez	Universidad Tecnológica de Pereira
8. Síntesis y caracterización de complejos de Ni(II) y Co(II) soportados en ligando N-heterocíclicos.	Sebastián Díaz Serrano	Dr. Álvaro Francisco de la Parra Morales Dra. Gala de la vega Dr. Esperanza Galarza Dr. Jhon Judy Hurtado Dr. Julián Patiño Rivera	Universidad del Valle
9. Diseño y síntesis de nuevos análogos de brasinoesteroides con actividades promotoras del crecimiento vegetal”	Karoll Ferrer Pertuz (Universidad Tecnica Federico		(Universidad Tecnica Federico Santa María- Chile)

	Santa María-Chile)		
10. Diseño y construcción de un dispositivo de inmersión y de una celda electroquímica”	Daniela Martínez	Dr. Drochss Petri	Universidad Santiago de Cali
11. Evaluación de interferencias por hierro, manganeso y aluminio en la cuantificación de boro en solución mediante el método de absorción molecular.	Andrea Carolina Begambre Berrio		(Universidad de Córdoba-Colombia)

MODALIDAD POSTER DE ESTUDIANTES DE POSGRADO O TRABAJOS SELECCIONADOS

Título de la conferencia	Estudiante	Asesor	Universidad	No. Poster
1. Estudio de interacciones supramoleculares de tres sales cuaternarias de amino-halometiladas.	Manuela López Rios	Dr. Rogelio Ocampo Dr. Rubén Tapasco Dr. Luz Amalia Rios	Universidad de Caldas	P1
2. Síntesis de nuevos complejos de Ni y Co con el ligando tipo pincer 2,6- bis (((6-nitro-1H-imidazol-1-1-metil)) piridina.	Johan Sebastián Aguilar	Dr. Álvaro Francisco de la Parra Morales Dra. Gala de la vega	Universidad del Valle	P3
3. Análisis experimental (DRX, FT-IR, UV-vis) y teórico(HF, DFT) del 2- metoxi-N-(3-nitrofenil) benzamida	Esteban García	Dr. Rodolfo Moreno Fuequen	Universidad del Valle	P4
4. Síntesis de iminopiridilpirazoles, coordinación a Paladio y actividad catalítica en reacciones de	Dorancelly Fernández	Dr. Fernando Coenú	Universidad del Quindío	P5

<i>acoplamiento C-C tipo Mizoroki- Heck</i>				
<i>5. Modelamiento y descripción estructural de la proteína PFO del lulo (Solanum quitoense Lam) var. Castilla</i>	Cristian Camilo Rocha	Dr. Diego Alejandro Molina Clara Mejía Doria	Universidad del Quindío	P7

Título de la conferencia	Estudiante	Asesor	Universidad	No. Poster
6. <i>Adsorción de metales pesados "Cr, Pb, Ni, Cd" por medio de subproductos del aguacate para la purificación del agua.</i>	Andrés Moreno Arredondo	Dr. Milton Gómez Barrera	Universidad del Quindío	P8
7. <i>Hydrogenación de un derivado porazólico de imina utilizando catalizador de Paladio- Imina</i>	María Isabel Murillo	Dr. Fernando Coenú Cabezas	Universidad del Quindío	P9
8. <i>Determinación in Vivode la inmunogeneidad del péctido lucilina proveniente de Lucila sericata en ratones BALBIC.</i>	Andrés Gonzálo Restrepo	Juan David Rivera	Universidad del Quindío	P10
9. <i>Síntesis y caracterización del complejo Pladio pirazolimina. Evaluación catalítica en reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki- Heck en medio acuoso</i>		Dr. Fernando Coenú Cabezas	Universidad del Quindío	P11
10. <i>Modificación de superficies electródicas con Grafeno para determinación de amoxicilina por métodos electroquímicos</i>	Angélica Hernández Lizbeth López	Dr. Drochss Valencia	Universidad Santiago de Cali	P12
11. <i>Síntesis y caracterización de compuestos mono y polinucleares de Cobre (II) y Cobalto (II) con derivados N-bencilados de la L-Val y L-Phe</i>	Damian Andrés Amaya Flórez Francis Dayán Rivas García	Dr. Edwin Flórez Dra. Yenny Avila	Universidad Santiago de Cali	P13

12. Implementación de un sistema de obtención de agua tipo II para ser usada en los laboratorios de investigación y docencia de la Universidad Santiago de Cali	Lizeth Arboleda Jaramillo, Stephania Arias González	Jorge Enrique Catillo	Universidad Santiago de Cali	P14
13. Interacciones intermoleculares de la proteína de membrana Arf*GTP con Potasio y Glicerol, componentes mayoritarios de la Vinaza de Caña de Azúcar.	Fernando Bonilla Millán	M.Sc Oscar Eduardo Rojas Alvarez.	Universidad Santiago de Cali	P15
14. Extracción etérea y alcohólica e identificación cualitativa de flavonoides en la guasca (<i>Galinsoga Parviflora</i>)	Carlos F. Londoño	Javier M. Posada	Universidad Santiago de Cali	P16
15. Obtención de Bioplástico a Partir de Cascara de Banano	Cindy Vanessa Castellanos Andrés Amaya Florez	Dr. Carlos Grande	Universidad Santiago de Cali	P17
16. Dinámica molecular de un polipirrol como sensor electroquímico en la detección de L-triptófano.	Maribel Holguín	M.Sc Oscar Eduardo Rojas Alvarez.	Universidad Santiago de Cali	P18
17. Adsorción y movilidad de cobre en un suelo andico	Jose Alexander Jimenez, Leydi Johanna Conú	Salamanca Edier Humberto Pérez	Universidad del Cauca	P19

18. <i>Obtención de un Biol vía fermentativa de residuos de cosecha frutales.</i>	Ximena Prieto	Salamanca Edier Humberto Pérez, Claudia Ximena Martínez	Universidad del Cauca	P20
19. <i>Adsorción de Cromo y Plomo en Materiales Lignocelulosos</i>	Jaime Andrés Parra Reyes	Salamanca Edier Humberto Pérez	Universidad del Cauca	P21
20. <i>Semisíntesis de derivados organometálicos de iridio (iii) a partir de un compuesto aril tetralin lignano</i>	Joan Sebastian Valencia Osorio	Dra. Clara Juliana Durango García	Universidad Antonio Nariño	P22
21. <i>Funcionalización de la podofilotoxina por quelación al centro metálico de iridio (III)</i>	Andrés Darío Betancourth Uribe	Dra. Clara Juliana Durango García	Universidad Antonio Nariño	P23
22. <i>Evaluación de interferencias por hierro, manganeso y aluminio en la cuantificación de boro en solución mediante el método de absorción molecular</i>	Andrea Carolina Begambre Berrio, Liz Karley Kerguelén Pacheco	Dra. Enrique Combatt	Universidad de Córdoba	P24
23. <i>Síntesis de un rotor molecular como celda fotovoltaica orgánica y su correlación estructural y óptica con los metalociclos respectivos de hierro y manganeso.</i>	Melissa Suarez Vanesa Vásquez	Dra. Yenny Avila	Universidad Tecnológica de Pereira	P25
24. <i>Evaluación preliminar de la actividad FTG en aminoalcoholes y sus respectivos compuestos de</i>	Jhon Guteque Gustavo Rojas	Dra. Yenny Avila	Universidad Tecnológica de Pereira	P26

<i>coordinación con el ion metálico cromo(III)</i>				
<i>25. Actividad oxidante del compuesto trinuclear de cobre $[Cu_3(R, R - CPSE)_3(H_2O)_3] \cdot 8H_2O$ como modelo funcional del centro activo de la metaloenzima Ascorbato Oxidasa frente a L- ácido ascórbico</i>	Didier Gómez	Dra. Yenny Avila	Universidad Tecnológica de Pereira	P27
<i>26. Recuperación de hidrocarburos a partir de residuos de polietileno de baja densidad</i>	Yeraldine Serna	Dra. Yenny Avila	Universidad Tecnológica de Pereira	P28

Título del poster	Estudiante	Asesor	Universidad	No. Poster
27. Síntesis y caracterización de β -aminoalcoholes derivados de aminas benciladas, anilinas y compuestos carbonílicos, como precursores en compuestos de coordinación.	Luis Fernando Mosquera Aguilar Andrés Felipe torres peña	Dr. Edwin Flórez López	Universidad Santiago de Cali	P29
28. Evaluación electroquímica del 2-aminotiazol mediante técnicas a potencial controlado	Andres Felipe Villamarin	Dr. Jimmy Alexander Morales Morales	Universidad Santiago de Cali	P30
29. Síntesis de un sistema químico protector por electrodeposición	Viviana Domínguez Vélez	Dr. Jimmy Alexander Morales Morales	Universidad Santiago de Cali	P31

sobre acero inoxidable 304 y titanio				
30. Diseño y Construcción de un dispositivo de inmersión y de una celda electroquímica	Daniela Martínez Bellaiza	Dr. Jimmy Alexander Morales Morales	Universidad Santiago de Cali	P32
31. Obtener depósitos de fosfatos de calcio sobre titanio mediante técnicas simples de química húmeda	Jessika Realpe Jaramillo	Dr. Jimmy Alexander Morales Morales	Universidad Santiago de Cali	P33
32. Síntesis, caracterización y estudio de la reducción electroquímica de algunos <i>p</i> -sustituidos 2-aminotiazoles. un combinado estudio experimental y computacional	Melina Salazar Osorio William Santacruz Parra	Dr. Jimmy Alexander Morales Morales	Universidad Santiago de Cali	P34
33. Síntesis enantiomérica de dibromuro de difeniletildiamonio (DFEDA-Br ₂)	Adrian Gurrute; Andres Delgado	Luis A. Lenis; Jeyson A. Cortés	Universidad del Cauca	P35
34. Síntesis y caracterización de nuevas espirooxindol pirrolizidinas	Manuel Julian Arboleda Arango	Jairo Quiroga Puello, Pablo Romo	Universidad del Valle	P36
35. Síntesis de ésteres y amidas desde un alcaloide obtenido del ají (capsicum annum)	Kevin Alexander Vallecilla Grueso y Jhoan Manuel Zuluaga Patiño	Fernando Agudelo	Universidad del Quindío	P37

36. Estudio teórico-experimental de la síntesis y propiedades físico-químicas de derivados de N-bencil Furfurilamina.	Jeisson David Corredor Montaña	Jovanny Arlés Gómez	Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia	P38
39. Síntesis de Polipirrol y Acoplamiento Laminar a Películas de Ácido Poliláctico, Análisis Electroquímico y Evaluación como Sensor de Óxidos de Nitrógeno	William Fernando Patarroyo Hernandez	Oscar Julio Medina Vargas	Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia	P39
40. Almidón modificado químicamente para la optimización de bioplásticos fotoactivos	Jorge Andrés Pulido Bonilla	Angélica García Torres.	Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia	P40
41. Síntesis y caracterización de dióxido de titanio dopado con hierro para el mejoramiento de sus propiedades ópticas.	Jheison Alexander Restrepo Ortiz	Dr. Hoover Valencia	Universidad Tecnológica de Pereira	P41
42. Desarrollo de un material alternativo al poliestireno expandido a partir del micelio del hongo pleurotus ostreatus	Paula Andrea Ochoa Triana	Oscar Julio Medina Vargas	Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia	P42
43. Síntesis y determinación estructural de complejos de coordinación de sb (III) con β -aminoácidos y derivados de benzaldehído	Ana Ivette Àgredo Bolaños	Edwin Flórez López	Universidad Santiago de Cali	P43

44. Aislamiento de nanofibras de celulosa y modificación de fibras vegetales a partir de residuos agroindustriales para su aplicación como refuerzo en materiales poliméricos	Santiago Valencia, Natalia Diaz	Marcelo Guancha, Jaime Gálvez	ASTIN	P44
45. Compuestos bioactivos de ganoderma lucidum y del sustrato agotado obtenidos mediante fluido súper crítico y análisis por cromatografía gaseosa y espectrofotometría de masas.	Wilder Ramirez Ayala	Carlos Alberto Guevara	Universidad del Quindío	P45
46. Evaluación del efecto de la concentración de inulina en la viscosidad de la mezcla de helado deslactosado.	Samuel David González Escobar, Isabel Velasco	Juan Sebastián Ramírez Navas	Universidad del Valle	P48
47. "Síntesis de las perovskitas Na_2TiO_3 y K_2TiO_3 dopadas con lantano y evaluación de la actividad fotocatalítica en la degradación de fenol"	Luis Fernando Patiño Correa, Jhonatan Corrales Jaramillo	Dr. Hoover Valencia	Universidad Tecnológica de Pereira	P49
48. Inmovilización de nanopartículas de TiO_2 modificadas con nitrógeno con absorción de luz visible, sobre quitosano y sus aplicaciones como superficies	Juliana Pérez	Dra. Paula Osorio, Dr. Julián Rengifo Herrera	Universidad Tecnológica de Pereira	P50

autolimpiantes inducidas por luz				
49. Síntesis y caracterización de $K_2La_2Ti_3O_{10}$ dopado con neodimio para modificar su gap óptico	Vladimir Arias	Dr. Hoover Valencia	Universidad Tecnológica de Pereira	P51
50. Cuantificación de metales y parámetros fisicoquímicos indicadores de contaminación del agua de las plantas de tratamiento puerto mallarino y cañaveralejo	Juan Sebastián Sánchez Hector Alfonso Melo	Dr. Jorge Enrique Castillo	Universidad Santiago de Cali	P52

RESUMENES

CONFERENCIAS CORTAS

Síntesis de 7-fenil-6*H*-cromeno[3,4-*b*]quinolinas promovida por $K_2S_2O_8$ vía reacción tándem imino Diels-Alder/oxidación entre anilinas y *O*-cinamil salicilaldehidos

Tipo / Estado del proyecto: Avances de investigación-Convocatoria Colciencias 706: Convocatoria nacional jóvenes investigadores e innovadores 2015

Nombres y apellidos de los ponentes: Angélica del Pilar Peñaranda Gómez, Carlos E. Puerto Galvis y Vladimir V. Kouznetsov*

Correo electrónico de contacto: angelica.penarandagomez@gmail.com

Institución: Laboratorio de Química Orgánica y Biomolecular, Universidad Industrial de Santander, Parque Tecnológico Guatimar, Km 2 Vía Refugio, Piedecuesta 681011, Colombia

Programa: Maestría en Química

Nombre del tutor del proyecto: Prof. Vladimir V. Kouznetsov, *PhD*

Resumen ejecutivo del trabajo: Se preparó y caracterizó una librería de nuevas 7-fenil-6*H*-cromeno[3,4-*b*]quinolinas a partir de anilinas y *O*-cinamil salicilaldehidos de origen comercial empleando como promotor de la reacción el persulfato de potasio ($K_2S_2O_8$). La formación de los productos obtenidos ocurre a través de un proceso tándem en el que se involucra una reacción imino Diels-Alder (Povarov) seguida de una oxidación

Palabras clave: Reacción imino Diels-Alder (Povarov), aromatización, cromeno[3,4-*b*]quinolinas, procesos tándem

Introducción: La preparación de cromeno-quinolinas ha despertado un gran interés para los químicos orgánicos debido a su amplio espectro de actividades biológicas, donde se destaca su potencial como agentes antitumorales, antioxidantes e inhibidores de estrógenos. Por ejemplo, la 6*H*-cromeno[4,3-*b*]quinolina fue reportada como el primer agente no esteroideo capaz de inhibir la unión de estrógenos a los sitios beta ($ER\beta$) del receptor de estrógeno. Por tal razón, la química orgánica y la química medicinal han resaltado la importancia de desarrollar nuevas estrategias de síntesis de estos sistemas policíclicos heteroaromáticos. Sin embargo, en la actualidad existen pocos reportes sobre la preparación de cromeno-quinolinas en comparación con otros compuestos heterocíclicos. Entre estos, se encuentran i) la condensación de derivados *O*-prenil salicilaldehidos con anilinas empleando

líquidos iónicos como medios de reacción ([Bmim]BF₄) ii) a partir de una base de Schiff (iminas) sometidas a una reacción tándem catalizada por complejos de cobre, y iii)

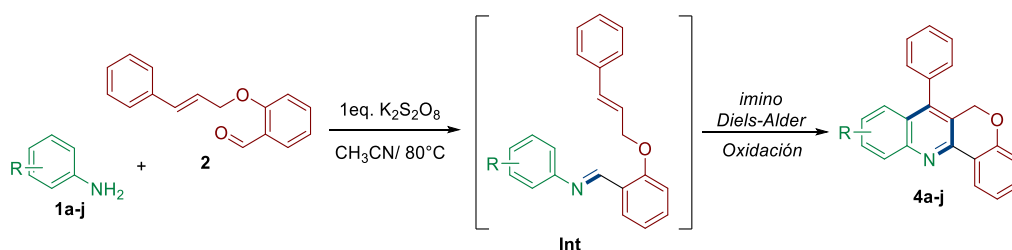
empleando sales de di-ariliodonio y sales de cobre como co-catalizadores sobre iminas. En general, estas metodologías requieren complejos de cobre costosos y triflatos derivados de lantanidos que conllevan a la generación de residuos metálicos, tóxicos y poco amigables con el medio ambiente. Por tal motivo, se requiere del desarrollo de nuevos protocolos sintéticos enfocado en los principios de la química verde para la preparación de estos compuestos. Nuestro laboratorio, en su interés por acceder a nuevos sistemas *O*- y *N*-heterocíclicos ha elaborado una ruta sencilla, eficaz y libre de metales de transición, para la preparación de nuevos derivados cromeno[4,3-*b*]quinolinas, vía reacción imino Diels-Alder (Povarov) seguida de una oxidación (reacción tándem) promovida por $K_2S_2O_8$, obteniendo de manera exitosa los productos de interés con rendimientos moderados.

Objetivo general: Sintetizar una serie de 7-fenil-6*H*-cromeno[3,4-*b*]quinolinas vía reacción tándem imino Diels-Alder/oxidación entre anilinas y *O*-cinamil salicilaldehidos promovida por $K_2S_2O_8$ en búsqueda de nuevos y selectivos compuestos bioactivos.

Objetivos específicos:

- Determinar las condiciones óptimas de reacción, que incluyan: solvente, agente oxidante, temperatura y tiempo, que permitan la síntesis de nuevas 7-fenil-6*H*-cromeno[3,4-*b*]quinolinas
- Preparar una librería de compuestos bajo las condiciones óptimas de reacción empleando diversas anilinas y *O*-cinamil salicilaldehidos de origen comercial y evaluar los efectos electrónicos y estéricos que puedan afectar el transcurso de la reacción.
- Caracterizar los compuestos obtenidos por medio de métodos espectroscópicos y espectrométricos.
-

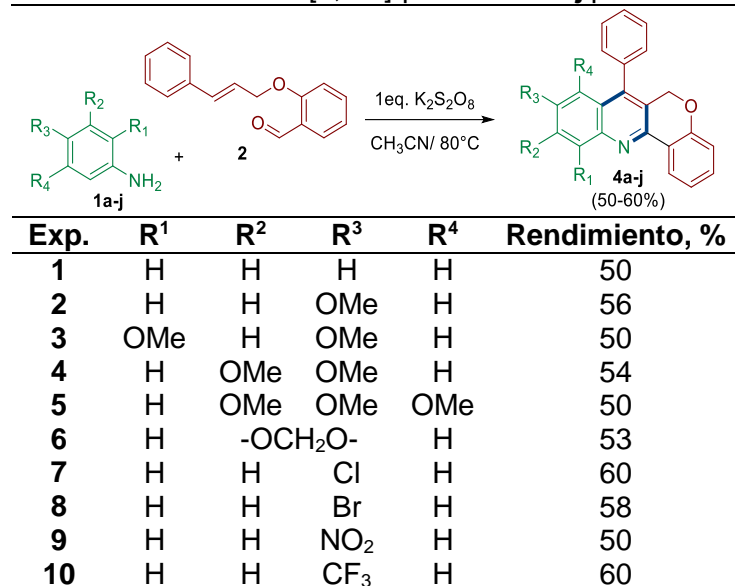
Metodología: El plan de actividades se enfocó en desarrollar la metodología mas eficiente para la síntesis de 7-fenil-6*H*-cromeno[3,4-*b*]quinolinas, eligiendo el mejor solvente, agente oxidante, temperatura y tiempo de reacción. Una vez seleccionado el $K_2S_2O_8$ en acetonitrilo a 80 °C por 24 h como las mejores condiciones de reacción, se procedió a preparar una nueva librería de 7-fenil-6*H*-cromeno[3,4-*b*]quinolinas **3a-j** a partir de anilinas **1a-j** y el *O*-cinamil salicilaldehido **2** (Esquema 1).



Esquema 1. Proceso tándem para la síntesis de 7-fenil-6*H*-cromeno[3,4-*b*]quinolinas promovida por $K_2S_2O_8$

Resultados: Bajo las condiciones óptimas de reacción, y empleando diversas anilinas sustituidas con grupos donores y aceptores de electrones, se logró la preparación de la serie de compuestos **4a-j** con rendimientos moderados (Tabla 1).

Tabla 1. Síntesis de 7-fenil-6H-cromeno[3,4-b]quinolinas **4a-j** promovida por $K_2S_2O_8$



La serie de compuestos **4a-j** fueron caracterizados mediante espectroscopia infrarroja (IR) y de Resonancia Magnética Nuclear (experimentos de RMN: ¹H, ¹³C, COSY, HMBC, HSQC) estableciendo plenamente su estructura. En conclusión, se preparó una serie de compuestos con un alto potencial biológico y farmacéutico empleando un protocolo suave, libre de metales de transición y utilizando como agente oxidante un compuesto de fácil acceso, económico y versátil.

Referencias Bibliográficas:

1. J.S. Yadav, B.V. Subba, G. Kondaji, S. Sowjanya, K. Nagaia, *J. Mol. Catal. A: Chem.*, **2006**, 258, 361.
2. S. Ramesh, V. Gaddam, R. Nagarajan, *Synlett*, **2009**, 5, 757.
3. Y. Xiaoqiang, W. Jiao, X. Zhanwei, Y. Yoshinori, B. Ming, *Org. Lett.*, **2016**, 18, 2491.

Evaluación de interferencias por hierro, manganeso y aluminio en la cuantificación de boro en solución mediante el método de absorción molecular

Tipo / Estado del proyecto: Investigación en curso

Nombres y apellidos de los ponentes (máximo dos): Andrea Carolina Begambre Berrio*, Liz Karley Kerguelén Pacheco

Correo electrónico de contacto: andreacbegambre@gmail.com*

Institución: Universidad de Córdoba

Semestre: X

Programa: Química

Nombre del tutor del proyecto: Enrique Miguel Combatt Caballero Ph.D

Resumen ejecutivo del trabajo: Este trabajo de investigación se planteó con el fin de evaluar las interferencias de Fe, Mn y Al en la cuantificación de boro en solución por el método de absorción molecular, ya que se suelen presentar sobreestimación en cuanto a la concentración real de boro en soluciones que presenten alta concentraciones de estos elementos. Se trabajó en una fase de laboratorio que consistió en preparar soluciones de boro a diferentes concentraciones, a las cuales se le agregaron diferentes concentraciones de Fe, Mn y Al. Posteriormente se realizaron las lecturas por colorimetría usando una solución buffer que contenía ácido tioglicólico y una solución de azometina-H en un espectrofotómetro UV-VIs a una longitud de onda de 420 nm. De los resultados obtenidos se puede concluir que Mn y Al no interfieren en la cuantificación de boro, mientras que Fe es el principal causante de dicha sobreestimación en la concentración de boro en solución. Además se observó que a concentraciones mayores de 18 mg/L de Fe presentes en la solución, el ácido tioglicólico que se usa como acomplejante no consigue eliminar las interferencias que origina el Fe en la cuantificación de boro en solución.

Resumen: El boro (B) es un micronutriente esencial requerido por las plantas para su normal desarrollo y crecimiento, y los suelos constituyen la fuente de B para las plantas, el cual es absorbido a través de las raíces. Estos pueden ser divididos en dos tipos: aquellos con bajo contenido ($<40 \text{ mg kg}^{-1}$) o alto contenido ($>70 \text{ mg kg}^{-1}$) (Power y Woods, 1997); siendo los primeros los que componen la mayoría de los suelos en Córdoba y Costa Caribe; mientras que los últimos son aquellos próximos a sitios con actividad volcánica y geológica. El B absorbido por las plantas generalmente está controlado por sus niveles en la solución del suelo más que por su contenido total, representando usualmente alrededor del 10% disponible para las plantas. En la determinación de boro disponible en suelos ácidos, suelen presentarse interferencias causadas por hierro convirtiéndose en el principal inconveniente a la hora de su cuantificación por métodos como absorción molecular. Los resultados obtenidos mediante esta técnica analítica no son 100% reales, pues interfiere Fe, Mn, Al generando una amplia variabilidad en los valores obtenidos. Por tanto, nació la necesidad de evaluar el efecto de diferentes concentraciones de hierro, aluminio y manganeso en soluciones con diferentes contenidos de boro en solución, así mismo determinar la concentración a la cual el ácido tioglicólico no elimina la interferencia causada por este

elemento. Este trabajo se está llevando a cabo en el Laboratorio de Suelos y Agua de la Universidad de Córdoba, donde se prepararon soluciones a diferentes concentraciones de boro 0.00, 0.18, 0.36, 0.72, 1.08 y 1.44 mg/L, posteriormente se les agregó diferentes concentraciones de Fe 0.00, 18, 54, 108, 162, 234 y 306 mg/L, Mn 0.00, 18, 36, 72, 144, 234 y 360 mg/L y Al 0.00, 18, 36, 54, 72, 90 y 108 mg/L a cada una de ellas. La cuantificación de boro se determinó por colorimetría en un espectrofotómetro GENESIS 20 a una longitud de onda de 420nm previamente establecida. Se encontró que Al y Mn no interfieren en la cuantificación de boro, mientras que Fe si causa dicha interferencia generando sobreestimaciones. De la misma manera, el ácido tioglicólico no logra eliminar esas interferencias a concentraciones mayores de 18 mg/L.

Palabras: Boro disponible, hierro, manganeso, aluminio, interferencias.

Introducción: El boro es un elemento fundamental en la tierra, generalmente se encuentra en forma oxidada como boratos o ácido bórico particularmente en océanos, rocas sedimentarias y algunos suelos (Ozturk et al., 2010). Además es un micronutriente esencial requerido por las plantas para su normal desarrollo y crecimiento (Malave, 2005). La determinación de este elemento en suelos por las técnicas como espectrometría, potenciometría, cromatografía, espectrometría de absorción, emisión atómica de llama, emisión de plasma por inducción (ICP) y espectrofotometría de masa; se ve afectada por las interferencias causadas por la presencia de iones como Fe, Mn, Al, Zn. En la cuantificación de B la técnica espectrofotométrica que utiliza una reacción colorimétrica de B con azometina-H, es el método de determinación de B más extensamente aplicado para muestras de suelo y de plantas, aunque los métodos colorimétricos, en general, sufren numerosas interferencias y tienen una deficiente sensibilidad y precisión (Sah et al., 1997).

Objetivo general: Evaluar el efecto de diferentes concentraciones de hierro, manganeso y aluminio en la cuantificación de boro mediante absorción molecular.

Objetivos específicos: Evaluar el efecto de diferentes concentraciones de hierro, manganeso y aluminio en soluciones con diferentes contenidos de boro.

Metodología:

Se prepararon siete soluciones de boro a una concentración de 0.00, 0.18, 0.36, 0.72, 1.08 y 1.44 mg/L a partir de una solución patrón de 1000 mg/L, a cada solución se agregaron concentraciones de hierro de 0.00, 18, 54, 108, 162, 234 y 306 mg/L, cada una por separado. De igual manera, se prepararon con soluciones de boro a las concentraciones establecidas anteriormente, a las cuales se le adicionaron concentraciones de Mn de 0.00, 18, 36, 72, 144, 234 y 360 mg/L y así mismo, se procedió para las soluciones de boro con concentraciones de Al de 0.00, 18, 36, 54, 72, 90 y 108 mg/L.

Posteriormente, de cada solución se tomaron cuatro (4) réplicas de 5 mL como alícuota y se transvasaron a vasos desechables, a la cual se le agregaron 2 mL de una solución buffer que contenía el ácido tioglicólico y 2 mL de una solución de azometina-H, agitando constantemente. Posteriormente se dejaron reposar durante 40 minutos y se realizó su lectura por espectrofotometría UV-Visible a una longitud de onda de 420 nm.

Resultados:

- El hierro presenta la mayor interferencia a la hora de cuantificar boro por el método de absorción molecular, mientras que el manganeso y el aluminio no interfieren en su determinación.
- Existe una sobreestimación en las concentraciones de boro en la determinación del mismo
- El ácido tioglicólico usado en el buffer no es capaz de eliminar las interferencias de hierro en la cuantificación de boro

Referencias:

- Ozturk, M., Sakcali, S., Gucel, S., y Tombuloglu, H. (Marzo, 2010) . Boron and Plants. Springer Science Business, 13, 1.
- Malavé, A. (2005). Los suelos como fuente de boro para las plantas. UDO Agrícola 5 (1): 10-26
- Sah, R., Brown, P. (1997). Techniques for boron determination and their application to the analysis of plant and soil samples. *Kluwer Academic Publishers, Plant and Soil* 193: 15–33.
- Power, P. y W. Woods. 1997. The chemistry of boron and its speciation in plants. *Plant Soil*, 193(1-2): 1-13.

Aplicación de la reacción de Grignard en la síntesis de moléculas fluoradas con potencial farmacológico

Nombres y apellidos de los ponentes: Marisol López Muñoz, Jessica Johanna Gómez peña

Coautores: Luz Amalia Ríos Vásquez, Rogelio Ocampo Cardona

Correo electrónico de contacto: marisol.16816218232@ucaldas.edu.co ,
marisol9181@gmail.com

Institución: Universidad de Caldas

Programa: Maestría en Química

Semestre: II

Nombre del tutor del proyecto: Luz Amalia Ríos Vásquez, Rogelio Ocampo Cardona

Resumen ejecutivo del trabajo: Este trabajo describe la aplicación de la reacción de Grignard para la síntesis de 4 nuevos α,α -difeníl- ω -bromoalcoholes con sustituyentes CF_3 en los anillos aromáticos con la preparación del reactivo de Grignard *in situ* de acuerdo con consideraciones de seguridad pertinentes debido su inestabilidad. Las reacciones fueron llevadas a cabo con protección hacia la luz para evitar la posible descomposición de los compuestos meta o p-trifluorometilbenceno. Los nuevos alcoholes se sintetizaron como precursores de sales cuaternarias de amonio de interés farmacológico en la búsqueda de agentes biológicamente activos hacia parásitos kinetoplásticos y fueron obtenidos con rendimientos del 84-85% crudos y 38 al 59% puros.

Palabras clave: trifluorometilo, reacción de Grignard, explosividad, alcoholes, intermediario farmacéutico.

Introducción: El grupo trifluorometilo (CF_3) es uno de los sustituyentes fluorados más comunes no sólo en química medicinal sino también en la industria de los agroquímicos,¹ ya que ofrece de manera simultánea una alta lipofilicidad, elevada densidad electrónica y demanda estérica similar a la del grupo isopropilo;^{2,3} por lo que los compuestos aromáticos sustituidos con el grupo trifluorometilo se usan ampliamente como intermediarios farmacéuticos.

La disponibilidad en el mercado de reactivos de Grignard que contengan el grupo CF_3 en la posición orto, meta o para del anillo de benceno ha sido discontinuada debido a su inestabilidad¹ por lo que se requiere su preparación *in situ*, a partir de los correspondientes bromuros altamente inestables a la luz. Sin embargo, la preparación del reactivo de

Grignard *in situ*, también representa un reto para evitar explosiones en el laboratorio, especialmente en reacción a gran escala, según existen reportes en la literatura⁴.

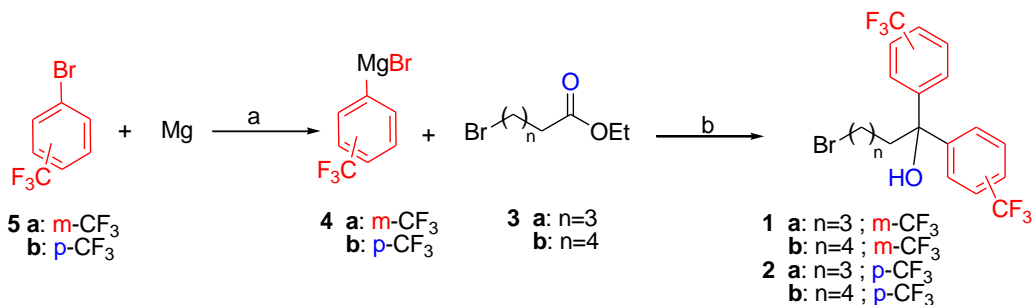
Una de las áreas de estudio del grupo de investigación Síntesis y Mecanismos de Reacción en Química orgánica de la Universidad de Caldas, se ha relacionado con la síntesis de sales cuaternarias de amonio en la búsqueda de agentes farmacológicamente activos contra parásitos de *Leishmania*,^{5,6} ya que estos compuestos son inhibidores específicos de la enzima colina/etanolamina de *Leishmania* spp. Teniendo presente las bondades del grupo CF₃ en compuestos con actividad biológica resulta novedoso realizar su incorporación a sales cuaternarias de amonio que son potenciales agentes farmacológicamente activos contra parásitos kinetoplásticos. Este estudio pretende aportar al conocimiento sobre la preparación de reactivos de Grignard aril sustituidos con grupos CF₃ y su inmediato uso para la síntesis de alcoholes terciarios como moléculas intermediarias en la obtención de sales cuaternarias de amonio con potencial farmacológico.

Objetivo general: Aplicar la reacción de Grignard de bromuros de trifluorometilarilo en la preparación de nuevos α,α -difeníl- ω -bromoalcoholes como precursores de sales cuaternarias de amonio trifluorometiladas

Objetivos específicos: Preparación de bromuro de 4-trifluorometilfenilmagnesio, como reactivo de Grignard para sintetizar los nuevos compuestos 5-bromo-1,1-bis-(4-trifluorometilfenil)-1-pentanol y 6-bromo-1,1-bis-(4-trifluorometilfenil)-1-hexanol. Preparación de bromuro de 3-trifluorometilfenilmagnesio, como reactivo de Grignard para sintetizar los nuevos compuestos 5-bromo-1,1-bis-(3-trifluorometilfenil)-1-pentanol y 6-bromo-1,1-bis-(3-trifluorometilfenil)-1-hexanol

Metodología: La reacción de Grignard para la síntesis de los α,α -difeníl- ω -bromoalcoholes con sustituyentes CF₃ en los anillos aromáticos se realizó de acuerdo a metodología reportada en la literatura⁷ con modificaciones por medio de dos pasos consecutivos involucrando i) preparación del reactivo de Grignard (**4a** o **4b**) partiendo del m-bromotrifluorometilbenceno **5a** o su respectivo isómero para **5b** y magnesio (2,4 equivalentes), empleando como solvente éter etílico seco. En el caso del reactivo de Grignard **4a**, una vez generado se transfirió de inmediato a través de una cánula a un balón de tres bocas debidamente equipado y bajo atmósfera de N₂ para la reacción siguiente; ii) una reacción de Grignard a partir del correspondiente ω -bromoéster (**3a** o **3b**) (1 equivalente) utilizando éter etílico seco como solvente. Sin embargo, el reactivo de Grignard **4b** formó una solución excesivamente espesa y no permitió su transferencia vía cánula, por lo cual la reacción respectiva debió llevarse a cabo *in situ*. La caracterización espectroscópica se llevó a cabo mediante resonancia magnética nuclear (RMN-¹H y RMN-¹³C) y espectroscopia de infrarrojo con transformada de Fourier. Los análisis de RMN-¹⁹F y espectrometría de masas de alta resolución están en proceso.

Resultados: El siguiente esquema describe la síntesis de los 4 nuevos α,α -difeníl- ω -bromoalcoholes con sustituyentes CF_3 en los anillos aromáticos:



Condiciones de reacción: a) Bajo atmósfera de N_2 , éter etílico seco. b) bajo atmósfera de N_2 , éter etílico seco, reactivo de Grignard (2.5 equivalentes)

- *5-bromo-1,1-bis-(3-trifluorometilfenil)-1-pentanol (1a)*. Partiendo del 5-bromovalerato de etilo **3a** (3.5 mmol), **1a** fue obtenido como aceite amarillo. (85% rendimiento crudo)
- *6-bromo-1,1-bis-(3-trifluorometilfenil)-1-hexanol (1b)*. Partiendo del 6-bromohexanoato de etilo **3b** (1.7 mmol), **1b** fue obtenido como aceite amarillo (59% rendimiento puro)
- *5-bromo-1,1-bis-(4-trifluorometilfenil)-1-pentanol (2a)*. Partiendo del 5-bromovalerato de etilo **3a** (3.7 mmol), **2a** fue obtenido como aceite amarillo. (84% rendimiento crudo)
- *6-bromo-1,1-bis-(4-trifluorometilfenil)-1-hexanol (2b)*. Partiendo del 6-bromohexanoato de etilo **3b** (1.7 mmol), **1b** fue obtenido como aceite amarillo (38% rendimiento puro)

Referencias Bibliográficas:

1. Zhao, W. (Ed.). (2016). *Handbook for Chemical Process Research and Development*. Crc Press.
2. López, S. E., & Romero, A. (2011). *Grupo trifluorometilo: un sustituyente importante en química medicinal*. *Rev Fac Farm UCV*, 74, 40-52.
3. Purser, S., Moore, P. R., Swallow, S., Gouverneur, V., Heidelberger, C., Chaudhuri, N. K., Hietala, J. (2008). *Fluorine in medicinal chemistry*. *Chem. Soc. Rev.*, 37(2), 320–330. <https://doi.org/10.1039/B610213C>
4. Waymouth, R.; Moore, E. J. *Chem. Eng. News* 1997, 75, 6
5. Duque-Benítez, S. M., Ríos-Vásquez, L. A., Ocampo-Cardona, R., Cedeño, D. L., Jones, M. A., Vélez, I. D., & Robledo, S. M. (2016). *Synthesis of Novel Quaternary Ammonium Salts and Their in Vitro Antileishmanial Activity and U-937 Cell Cytotoxicity*. *Molecules*, 21(4), 381-296. <http://doi.org/10.3390/molecules21040381>
6. Ríos, L. A.; Ocampo, R.; Duque, S. M.; Robledo, S.M.; Vélez, I. D.; Cedeño, D. L.; Jones, M. A. (2015) "Quaternary N-(Halomethyl) Ammonium Salts as Therapeutic Agents". Patent US 9145352 B2, 29 September

Evaluación de la actividad citotóxica en células HeLa y evaluación de la catalítica en reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck de un complejo de paladio-aminopirazol

Tipo / Estado del proyecto: Terminado

Nombres y apellidos de los ponentes (máximo dos): Natalia Muñoz Patiño

Correo electrónico de contacto: natym_0708@hotmail.com

Institución: Universidad del Quindío

Programa: Química

Semestre: 10

Nombre del tutor del proyecto: Fernando Cuenú Cabezas – Alejandro Hernández – Diego Molina

Resumen ejecutivo del trabajo: En este trabajo se reporta la síntesis y caracterización de un complejo de paladio-aminopirazol, su evaluación citotóxica en células HeLa y la evaluación catalítica en reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck, entre bromobenzaldehídos y estireno.

Resumen: En el presente trabajo se reporta la síntesis y caracterización del complejo $[PdCl_2Pzol]_2$ donde Pzol es [1-(3-nitrofenil)-3-*tert*-butil-5-aminopirazol] (1), el complejo de paladio se evaluó en reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki Heck entre 2-, 3- y 4-bromobenzaldehído y estireno, en donde al variar la posición del bromo en el haluro de arilo, la actividad y selectividad del catalizador se ve afectada, siendo más activo con 3-bromobenzaldehído y regio selectivo hacia el estirilbenzaldehído cuando el sustrato es 2 o 4-bromobenzaldehído. En cuanto a la actividad citotóxica en células HeLa, se encontró que el complejo Pd-Pzol es más activo que el ligando libre, aumentando su efecto citotóxico, inhibiendo el crecimiento celular aproximadamente al 50% en concentraciones menores a 100 μ M.

Palabras clave (máximo 5): Paladio, Aminopirazoles, Mizoroki-Heck, Citotoxicidad

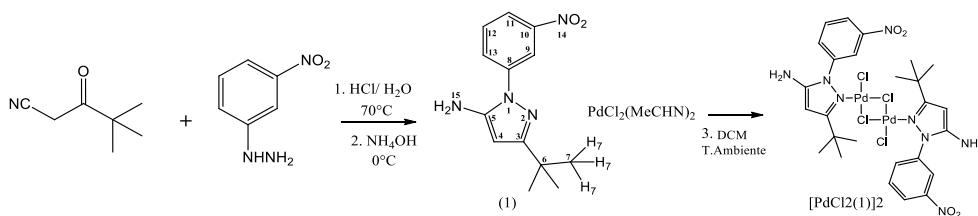
Introducción: Dentro de las reacciones catalíticas más importantes en las que se usan complejos de paladio como catalizadores, se encuentran las reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki – Heck, la cual se ha convertido en una herramienta indispensable, ya que es utilizada para la formación de nuevos enlaces carbono-carbono^[1]. Esta reacción es generalmente catalizada en solución por especies de paladio generadas por complejos de Pd(0), tales como $[Pd(PPh_3)_4]$ y $[Pd_2(dba)_3]$ o sales de Pd(II), como $[PdCl_2]$, $[Pd_2(OAc)_3]$ ^[2]. A pesar que los ligandos fosfinados inducen al metal excelentes propiedades estéricas y electrónicas, presentan inconvenientes como su inestabilidad cuando se trabaja a altas

temperaturas, generando el óxido de la fosfina que se disocia del catalizador, desactivándolo, y generando la formación de paladio negro, el cual es poco activo y selectivo^[3]. Con el fin encontrar una alternativa a este problema, nuestro grupo ha trabajado en la síntesis de ligandos N-heterociclos para coordinarlos a metales de transición y posteriormente utilizarlos como catalizadores en diferentes reacciones catalíticas, y ha encontrado que estos compuestos son activos y selectivos^[2]. Dentro de los compuestos N-heterociclos se encuentran los pirazoles, los cuales son interesantes debido a su síntesis versátil y el amplio espectro de propiedades biológicas, agroquímicas y aplicaciones analíticas que presentan. Se ha reportado que los complejos con metales de transición que contienen diferentes clases de pirazoles constituyen una posición privilegiada en el diseño y síntesis de nuevos agentes biológicamente activos que muestran actividades medicinales útiles, incluso se ha notificado que poseen actividad antitumoral comparable con la de cisplatino^[4-6]. Es por esto que se tiene gran interés en complejos de paladio con ligandos pirazólicos con posible actividad citotóxica y catalítica. Es por esto que en este trabajo se presenta la síntesis de complejos de paladio con ligandos aminopirazoles los cuales se evaluaron en reacciones tipo Mizoroki-Heck.

Objetivo general: Sintetizar un derivado pirazólico, coordinarlo a paladio y evaluar su actividad biológica y catalítica en reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck entre 2, 3 y 4- bromobenzaldehído y estireno.

Objetivos específicos: Realizar la síntesis y caracterización espectroscópica del pirazol [1-(3-nitrofenil)-3-*tert*-butil-5-aminopirazol] (**1**) y su respectivo complejo de paladio. Evaluar la actividad y selectividad catalítica del complejo de paladio sintetizados, en reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck, entre los sustratos 2, 3 y 4-bromobenzaldehído y estireno. Evaluar la citotoxicidad en células HeLa del complejo y ligando sintetizados.

Metodología: El pirazol (**1**), fue sintetizado siguiendo la metodología reportada en la literatura^[7]. Para la formación del complejo paladio-pirazol, se utilizó una relación molar 1:1 entre el ligante y la sal de paladio (dicloro-bis(acetonitrilo)paladio (II)). El solvente utilizado fue diclorometano seco, la reacción se realizó en atmósfera inerte de N₂ a temperatura ambiente durante 7 horas (esquema 1). Los compuestos fueron caracterizados mediante técnicas espectroscópicas como masas, IR y RMN.



Esquema 1. Síntesis del compuesto (1) y el complejo de paladio-pirazol

H, en las vibraciones simétricas y asimétricas C-H del grupo *tert*-butil, $\nu_{as}-CH_3$ 2967 cm^{-1} (Ligando 2958 cm^{-1}), ν_s-CH_3 2870 cm^{-1} (Ligando 2861 cm^{-1}) y en las vibraciones del grupo nitro, $\nu_{as}-NO_2$ 1533 cm^{-1} (Ligando 1508), ν_s-NO_2 1352 cm^{-1} (Ligando 1338 cm^{-1}).

En los espectros de RMN del complejo, se presentan las mismas cinco señales características del ligando, con pequeños desplazamientos a campo alto en los protones del anillo aromático, lo que es consistente con una retrodonación de densidad de carga que realiza el metal a los orbitales π vacíos del pirazol. También se observaron desplazamientos a campo bajo en los protones del anillo pirazólico como es el caso del H-4 y los protones del grupo amina, que en el ligando libre se encuentran a 5.48 ppm y en el complejo a 5.60 ppm, mostrando que el paladio se ha coordinado al nitrógeno 2 de este anillo y que el ligando (1), se comporta como un donador σ .

En la tabla 1, se muestran los resultados obtenidos de la evaluación del complejo paladio-pirazol en reacciones de Mizoroki-Heck entre 2, 3 y 4-bromobenzaldehído con estireno. Al comparar los resultados entre los diferentes sustratos se observa que al variar la posición del bromo en el haluro de arilo, la actividad y selectividad del catalizador se ve afectada, así el complejo es más activo cuando reacciona con 3-bromobenzaldehído y es regioselectivo cuando reacciona con 2- o con 4-bromobenzaldehído. Cuando el sustrato es 2-bromobenzaldehído se observó que el catalizador es menos activo, convirtiendo el 70% del sustrato en 24 horas y presentando un bajo TOF (86 h^{-1}) comparado con los otros sustratos en donde se presentan mayores conversiones en 2 horas, esta diferencia en la actividad del catalizador es debida posiblemente al impedimento estérico que el grupo aldehído genera sobre el Br en posición *orto*, haciendo más lenta la adición del haluro de arilo en el complejo.

Tabla 1. Reacciones de Heck entre Br-benzaldehídos y estireno con $[PdCl_2(1)]_2$

	Tiempo (h)	%Conversión	%Selec. (a)	% Selec. (b)	TOF	TON
2Br	2	0	--	--	-	-
2Br	24	69	100	--	86	2065
3Br	2	100	68	32	1500	3000
4Br	2	51	100	0	764	1529

En cuanto a la citotoxicidad en células HeLa, se encontró que cuando el pirazol es coordinado a paladio su efecto citotóxico aumenta, inhibiendo el crecimiento celular más del 50% en concentraciones de 100 μM (tabla 2), lo cual es un resultado prometedor debido a que según Z. f. Chen et. al. la concentración de cis-platino, fármaco usado por excelencia para el tratamiento de diferentes tipos de cáncer, que inhibe el 50% del crecimiento en este tipo de células es mayor a 150 μM .

Tabla 2. Porcentaje de crecimiento celular en células HeLa

Compuesto	Porcentaje de crecimiento celular (%) HeLa				
	Control	200 μ M	100 μ M	50 μ M	25 μ M
1	99.9 \pm 0.3	97.4 \pm 5.9	98.7 \pm 0.3	97.4 \pm 0.1	98.0 \pm 0.1
[Pd₂Cl₄(1)₂]	99.9 \pm 0.3	0	30.0 \pm 2.4	75.9 \pm 1.8	92.6 \pm 4.5

Referencias:

- [1] García, J. J. *Educ. quím. UNAM* **2011**, 22, 69–71.
- [2] Cuenú F. Abonia R. Bolaños A. Cabrera A. *J. Organomet. Chem.* 696 (**2011**) 1834-18394.
- [3] Avendaño, C. *An. R. Acad. Nac. Farm* **2010**, 76, 541–571
- [4] Roucoux, A.; Schulz, J.; Patin, H. *Chem. Rev.* **2002**, 102, 3757–3778.
- [5] Zora, M.; Demirci, D.; Kivrak, A.; Kelgokmen, Y. *Tetrahedron Lett.* 2016, 57, 993–997.
- [6] Perez, J. A.; Montoya, V.; Ayllon, J. A.; Font-Bardia, M.; Calvet, T.; Pons, J. *Inorganica Chim. Acta* **2013**, 394, 21–30.
- [7] Hernández-Ortega, S.; Cuenú-Cabezas, F.; Abonia-González, R.; Cabrera-Ortiz, A. *Acta Crystallogr. Sect. E Struct. Reports Online*

Modificación de superficies electródicas con Grafeno para determinación de Capsaicina en parches transdérmicos por métodos electroquímicos

Nombres y apellidos de los ponentes (máximo dos): Liseth D. Barbosa Otalvaro

Correo electrónico de contacto: lisethdamaris@hotmail.com

Institución: Universidad Santiago de Cali

Programa: Química

Semestre: 9

Nombre del tutor del proyecto: Drochss Petry Valencia

Resumen: Se desarrollará un sensor electroquímico para la detección de la Capsaicina en parches transdérmicos a partir de un electrodo de carbono modificado con grafeno encorado con catecol (grafeno-catecol). El grafeno será sintetizado usando una oxidación-reducción in situ de grafito, este proceso se conoce como método modificado por Hummers. La película de Nafion-Catecol-Grafeno (NCG) será depositada sobre la superficie del electrodo mediante el método de adsorción seca in situ. Tal electrodo basado en NCG puede mostrar una actividad electroquímica muy alta para la oxidación electrocatalítica de la Capsaicina a diferentes pH. El sensor propuesto puede aplicarse a la identificación y cuantificación de Capsaicina en parches transdérmicos con un rango lineal y con un límite de detección bajo. El análisis de los resultados experimentales puede utilizarse para proporcionar mejores estimaciones de la reproducibilidad experimental y la estabilidad a corto y largo plazo del sensor, así como una selectividad evitando el efecto de las matrices.

Palabras clave (máximo 5) Grafeno-Nafion, Método Hummers, Modificación de superficies, Nuevos materiales.

Introducción: En general la modificación de superficies electródicas sirve para mejorar la selectividad y sensibilidad de los sensores químicos y electroquímicos. Normalmente estas modificaciones nos permiten obtener una mayor selectividad y/o sensibilidad en la determinación de una especie de interés en una matriz compleja. Los métodos electroquímicos muestran alta sensibilidad, bajo costo, tiempos de análisis cortos comparados con otras técnicas de análisis. Por ende, se han convertido en una herramienta efectiva para el análisis de medicamentos en formulaciones farmacéuticas.

Entonces, el objetivo de este estudio es desarrollar un método simple y rápido para el análisis de Capsaicina en parches transdérmicos. En este estudio se pretende evaluar ¿Cómo modificar con grafeno superficies de carbón vítreo, para la determinación cualitativa y/o cuantitativa de Capsaicina en una formulación farmacéutica? Las técnicas electroquímicas para la determinación de la capsaicina que serán utilizadas serán

voltametría de onda cuadrada, voltametría cíclica y cronoamperometría de doble pulso, esto será realizado tanto con un electrodo sin modificar, como con los electrodos modificados con grafeno. Los resultados serán comparados con técnicas como cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC), técnica usualmente utilizada en la determinación de esta especie.

Objetivos generales: Determinar Capsaicina mediante la aplicación de EQM con Grafeno.

Objetivos específicos: Sintetizar Grafeno oxidado y reducido mediante el método hummers modificado. Modificar un electrodo para la determinación cualitativa y/o cuantitativa de sustancias de interés. Detectar y/o cuantificar electroquímicamente Capsaicina en una formulación farmacéutica

Metodología:

1. Síntesis de grafeno (GR)

En primer lugar sintetizar el óxido de grafeno mediante el método modificado de Hummers, luego el grafeno se obtiene por reducción del óxido de grafeno (OG) previamente generado.

2. Síntesis de óxido de grafeno (OG) mediante método Hummers modificado:

Se realizará una mezcla en un vaso de 250 mL, en constante agitación y a baño frío de: 2,0 g de Grafito en polvo, 1,0 g de nitrato sódico (NaNO_3), 50 mL de ácido sulfúrico concentrado (H_2SO_4). Posteriormente se le adicionara lentamente 6,0 g de permanganato de potasio (KMnO_4), en constante agitación y a una temperatura controlada entre 20 °C y 25 °C; 5 minutos después, se retira del baño frío y el sistema se calentará a 35 °C por 30 minuto; luego se añadirá lentamente 100 mL de H_2O desionizada al sistema y se agitara por 15 minutos. A continuación se agregara una solución (donde el agua utilizada se calienta a 60 °C), de 80 mL al 6% de peróxido de hidrogeno (H_2O_2), esto con la finalidad de reducir el permanganato de potasio (KMnO_4) residual (y se espera hasta que el burbujeo desaparezca). Posteriormente la mezcla se centrifugará a 4000 rpm por 1 hora y el residuo se enjuagara con agua tibia hasta que alcance un pH de 7,00. El polvo obtenido se dispersara en H_2O y se sonicará suavemente por 15 minutos. Finalmente se filtrara, y las trazas negras obtenidas se congelaran y después se secan en horno al vacío; y de esta forma se obtendrá el polvo de GO. [6]

3. Síntesis de óxido de grafeno reducido (OGR)

Se dispersara GO (1mg/mL) en agua desionizada y se agitara mecánicamente durante 1 hora para obtener una solución homogénea. Posteriormente se adicionara borohidruro de sodio (NaBH_4) 10 mM. La mezcla se colocará en un baño de aceite a 90 °C durante 24 horas. La reducción del GO se precipita gradualmente como un sólido negro. Este producto se lavara con abundante agua y después se secura mediante liofilización.

Añadir 5 mL de la dispersión acuosa del GO (1 mg/mL) a un erlenmeyer de 500 mL y dejara secar a temperatura ambiente. El GO formara una película en el fondo del matraz. Calentar

durante 2 minutos. Una vez terminada la reacción el producto tendrá un cambio de coloración. Guardar una muestra para su caracterización. [7]

4. Caracterización de OGR

Realizar espectroscopia IR, Difracción de rayos X, Espectroscopia Raman y Microscopia electrónica de barrido para la caracterización del grafeno obtenido.

5. Preparación de los electrodos modificados (GR-NF/GCE)

Sobre una superficie de carbón vítreo (u oro), previamente pulida con alúmina (3.0 μm) y/o polvo de diamante, colocar 3.0 μL de una suspensión de grafeno en una mezcla de DMF+Nafion (1:1), evaporar esta suspensión en la presencia de un flujo de aire caliente por 25 minutos, después de evaporado el disolvente una segunda y tercera adición de la suspensión es colocada sobre la superficie del electrodo, con el fin de obtener una superficie completamente modificada. Al terminar la modificación, el electrodo es colocado en un desecador por 12 horas antes de su utilización.

6. preparación de la muestra a analizar: Se realiza preparación de la muestra de acuerdo a los procedimientos farmacéuticos previamente descritos en la farmacopea americana o métodos del fabricante.

Resultados: 1. Con este proyecto se pretende detectar y/o cuantificar Capsaicina en una formulación farmacéutica, mediante el uso de un electrodo de grafeno químicamente modificado.
2. Generar el trabajo de grado en forma de artículo y dependiendo de la calidad de los resultados un artículo en una revista científica de alto impacto

Referencias Bibliográficas:

- [1] S. Alegret, M. Del Valle, A. Merkoçi, "Sensores electroquímicos: introducción a los quimiosensores y biosensores: curso teórico-práctico," *Servei de Publicacions*. 1^a Edición (2004), pp. 57-62.
- [2] F. Tonelli, V. Goulart, K. Gomes, M. Ladeira, A. Santos, "Graphene-based nanomaterials: Biological and medical applications and toxicity," *Nanomedicine* 10 (2015), pp. 2423-2450.
- [3] A. Yiğit, Y. Yardım, "Graphene/Nafion composite film modified glassy carbon electrode for simultaneous determination of paracetamol, aspirin and caffeine in pharmaceutical formulations," *Talanta* 158 (2016), pp. 21-29.
- [4] M. Sajid, M. Nazal, M. Mansha, A. Alsharaa, S. Jilani, C. Basheer, "Chemically modified electrodes for electrochemical detection of dopamine in the presence of uric acid and ascorbic acid: A review," *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 76 (2016), pp. 15-29
- [5] F. Bonaccorso, A. Lombardo, T. Hasan, Z. Sun, L. Colombo, A. Ferrari, "Production and processing of graphene and 2d crystals," *Materials Today* 15 (2012), pp. 564-589.

- [6] J. Phiri, P. Gane, T. Maloney, "General overview of graphene: Production, properties and application in polymer composites," *Materials Science and Engineering: B.*, 215 (2017), pp. 9-28.
- [7] W. Ying, L. Zhaohui, W. Jun, L. Jinghong, L. Yuehe, " Graphene and graphene oxide: biofunctionalization and applications in biotechnology," *Trends in Biotechnology.*, 29 (2011), pp.205-212.
- [8] S. Stankovich, D. Dikin, R. Piner, K. Kohlhaas, A. Kleinhammes, Y. jia, Y. Wu, S. Nguyen, R. Ruoff, "Synthesis of graphene-based nanosheets via chemical reduction of exfoliated graphite oxide," *Carbon.*, 45 (2007), pp. 1558–1565.
- [9] J. He, L. Fang, "Controllable synthesis of reduced graphene oxide," *Current Applied Physics.*, 16 (2016), pp.1152-1158.
- [10] Y. Yardım. Z. Şentürk, "Electrochemical evaluation and adsorptive stripping voltammetric determination of capsaicin or dihydrocapsaicin on a disposable pencil graphite electrode," *Talanta.*, 112 (2013), pp.11-19.

**Síntesis y Caracterización de Nanorecubrimientos de Nitruros de Cobre (Cu₃N)
Logrados por la Técnica de Pulverización Catódica, para Aplicaciones en
Electrónica Flexible**

Tipo / Estado del proyecto: Materiales - Procesos

Propuesta:

Avance:

Finalizado: X

Nombres y apellidos de los ponentes (máximo dos): Lina Marcela Agudelo Charry

Correo electrónico de contacto: marcemario.lmac@gmail.com

Institución: Universidad Santiago de Cali

Programa: Química

Semestre: Séptimo

Nombre del tutor del proyecto: Dr. Franklin Muñoz Muñoz

Resumen ejecutivo del trabajo:

Se realizó la síntesis y caracterización de nanorecubrimientos (películas delgadas) de nitruro de cobre (Cu₃N), mediante Sputtering asistida por magnetrón, en donde se determinó la influencia de variables como flujo de N₂ en un rango de 3-20 cm³.min⁻¹, tiempo de reacción, y potencia aplicada (60-80 W), sobre propiedades del material, como son: espesor del recubrimiento, composición química y propiedades eléctricas para aplicaciones en la electrónica flexible.

Resumen:

Se realizaron depósitos de películas delgadas (300-600 nm) de nitruro de cobre (Cu₃N), mediante la técnica de pulverización catódica (Sputtering) asistida por magnetrón, usando cobre metálico como material blanco, argón (Ar) como gas de arrastre, y nitrógeno molecular (N₂) como gas precursor. Los depósitos se realizaron sobre soportes laminares de silicio, vidrio y policarbonato (polímero flexible). Se determinó la influencia de variables como flujo de N₂ en un rango de 3-20 cm³.min⁻¹, tiempo de reacción, y potencia aplicada (60-80 W), sobre propiedades del material, como son: espesor del recubrimiento, composición química y propiedades eléctricas. La composición química elemental fue determinada por *Espectroscopia Fotoelectrónica de Rayos X* (XPS); la composición de fases mediante la técnica de *Difracción de Rayos X* (XRD); la morfología y espesor fue evaluado por *Microscopía Electrónica de Barrido* (SEM), *Microscopía Electrónica de Transmisión* (TEM) y *Microscopía de Fuerza Atómica* (AFM); las propiedades eléctricas

fueron medidas usando un sistema ECOPIA de Efecto Hall; y las propiedades térmicas fueron evaluadas por análisis termogravimétrico (TGA) y Calorimetría Diferencial de Barrido (DSC). En este trabajo se encontró que al aumentar tanto el flujo de N_2 como los tiempos de reacción y la potencia de trabajo, se favorece el crecimiento de Cu_3N y se reduce la cantidad de Cu^0 . Las propiedades eléctricas y la morfología de la superficie varían dependiendo del contenido elemental de nitrógeno en el depósito. En consecuencia, la capacidad de conducción eléctrica presentada por el policarbonato recubierto con películas delgadas de Cu_3N , lo potencian como candidato para su uso en aplicaciones relacionadas con electrónica flexible, un tema que actualmente ha despertado gran interés. Las temperaturas de degradación del Cu_3N en las muestras sintetizadas corresponden a las reportadas en la literatura para este material.

Palabras clave (máximo 5)

Nanorecubrimiento, nitruros de cobre, electrónica flexible.

Introducción:

Actualmente la tecnología marca un papel muy significativo dentro de la sociedad; el desarrollo de esta ha ayudado a conquistar las barreras de la comunicación y reducir la brecha entre las personas en todo el mundo, por esto es que se ha venido implementado e innovando en esta materia. Un ejemplo muy claro de ello son las investigaciones que se han venido adelantando sobre la electrónica flexible, ya que ha resultado ser un tema de gran interés.

La pulverización catódica asistida por magnetrón se ha convertido en el proceso de elección para la deposición de una amplia gama de revestimientos de importancia industrial. Los ejemplos incluyen revestimientos duros, resistentes al desgaste, revestimientos de baja fricción, recubrimientos resistentes a la corrosión, revestimientos decorativos y recubrimientos con propiedades ópticas o eléctricas específicas. Aunque el proceso básico de pulverización catódica ha sido conocido y usado desde hace muchos años, es el desarrollo del magnetrón desequilibrado y su incorporación en sistemas de "campo cerrado" multi-fuente que han sido responsables del aumento de importancia de esta técnica. El bombardeo por magnetrón desequilibrado de campo cerrado es una técnica excepcionalmente versátil para la deposición de películas de alta calidad y bien adheridas.

La composición química y física, la orientación y las propiedades de las superficies difieren de las del interior del sólido macizo. Las técnicas actuales de caracterización de superficies, se clasifican en dos amplias categorías: las que se centran en unas pocas capas más exteriores y las que incluyen en su enfoque los componentes presentes varios millares de angstroms hacia el interior del sólido.

Objetivos generales:

Sintetizar y caracterizar recubrimientos de nitruro de cobre a escala nanométrica por medio de la técnica especializada pulverización catódica para uso y aplicaciones en la electrónica flexible.

Objetivos específicos:

Realizar depósitos de películas delgadas de nitruro de cobre sobre tres diferentes sustratos, (silicio, vidrio y policarbonato).

Determinar la composición química elemental de las películas delgadas por medio de Espectroscopia Fotoelectrónica de Rayos X (XPS).

Determinar la composición de fases mediante la técnica de Difracción de Rayos X (XRD).

Evaluar la morfología y espesor por medio de Microscopía Electrónica de Barrido (SEM) y Microscopía de Fuerza Atómica (AFM).

Medir las propiedades eléctricas usando un sistema ECOPIA de Efecto Hall; y evaluar las propiedades térmicas por medio de un análisis termogravimétrico (TGA).

Definir si el policarbonato recubierto con películas delgadas de Cu_3N , puede ser postulado como un buen candidato, para su uso en aplicaciones relacionadas con electrónica flexible.

Metodología:

Para realizar la deposición de películas delgadas de nitruro de cobre, se emplearon pequeños sustratos laminares, los cuales fueron silicio, vidrio y polímero flexible (policarbonato), cada uno de estos recibía dos previos baños de ultrasonido, cada uno de 15 min, con dos tipos de solventes distintos (isopropanol y acetona).

Al tener los sustratos totalmente limpios, se procedía a realizar los depósitos de las películas delgadas por medio de un Pulverizador Catódico (Sputtering) asistido por magnetrón (ver Fig. 1.), utilizando cobre metálico como material blanco; en donde como primera medida se debía llegar a un vacío con una presión base de $2,0 \times 10^{-5}$ torr, seguidamente se aplicaron potenciales de 60 y 80 W, flujos del gas precursor (nitrógeno) entre $3\text{-}20 \text{ cm}^3 \cdot \text{min}^{-1}$, flujo constante del gas de arrastre (argón) a $15 \text{ cm}^3 \cdot \text{min}^{-1}$ y tiempos de depósito entre 1-3 min.

Al final del muestreo se obtuvieron en promedio un conjunto de 26 muestras, de las cuales se eligieron las más significativas según la cantidad de flujo suministrado del gas precursor y el tiempo de reacción, siendo así las muestras con flujos de 3/15 N_2/Ar (2 min), 10/15 N_2/Ar (2 min), 20/15 N_2/Ar (2 min), 20/15 N_2/Ar (3 min), sometidas bajo análisis y caracterización.

Caracterización muestras

Se realizaron distintas técnicas de caracterización para las muestras anteriormente descritas, las cuales se indican a continuación:

Espectroscopia Fotoelectrónica de Rayos X (XPS)

Por medio de esta técnica (ver Fig. 2.) se determinó la composición química elemental en los primeros 10 nm de las muestras después de haber erosionado la superficie de estas dentro del mismo equipo marca Specs.

El sistema cuenta con un cañón de electrones, dos fuentes de rayos X, un analizador de amplio ángulo, cañón de iones de argón, espectrómetro de masas de gases residuales, detector de electrones secundarios y un sistema de vacío que cuenta con 4 bombas mecánicas, 4 bombas turbo moleculares y una bomba iónica. Además, cuenta con una cámara de tratamiento en alta presión y una cámara de transferencia.

Para iniciar el análisis con este equipo de alta resolución, tiene que llegar a un ultravacío, y de esta manera poder proceder a introducir la muestra en el cañón.

Difracción de Rayos X (XRD)

Por medio de esta técnica (ver Fig. 3.) se determinó la composición de fases de la muestra, con un equipo marca Bruker modelo D2-Phaser. Para la introducción de la muestra dentro del equipo, se debía extraer la porta-muestras y asegurar el depósito de la película delgada sobre esta; enseguida se colocaba dentro y se iniciaba con el análisis, adecuado los parámetros necesarios y estableciendo el ángulo de incidencia del rayo, que en este caso fue de 2θ .

Microscopía Electrónica de Barrido (SEM)

El espesor de las películas delgadas fue determinado por medio de esta técnica (ver Fig. 4.), realizando un corte transversal en las muestras para ser puestas en el portamuestras del equipo y posteriormente ser introducidas dentro de este para realizar el correspondiente análisis.

Preparación muestra para Microscopia de transmisión electrónica (TEM)

Para realizar un análisis por medio de Microscopia de Transmisión Electrónica, la muestra debe recibir un pre-tratamiento especial el cual debe ejecutarse meticulosamente.

La muestra se pegó sobre vidrio con resina temporal, para poder cortar cuatro pequeñas barras. Enseguida se prepara resina permanente con una pequeña parte de catalizador y resina temporal calentada a 200°C hasta obtener un color miel oscuro y así lograr una perfecta adhesión entre las barras. Después estas se pegan teniendo en cuenta que la película debe de quedar protegida, sometiéndolas bajo calentamiento a una temperatura cercana a los 200°C, una vez hecho esto, se inició con el proceso de lijado y pulido el cual terminó cuando la muestra brilló ámbar (ver Fig. 5.). Tras haber obtenido ese brillo en la muestra, se procede a montarla sobre una rejilla, y finalmente hacer el análisis en el equipo TEM (ver Fig. 6.).

Microscopia de fuerza atómica (AFM)

Por medio de esta técnica (*ver Fig. 7.*) se observó la morfología de las películas y nuevamente se determinó el espesor de las estas mismas, esta vez haciendo un escalón al vidrio con cinta previo a realizar el depósito; en donde esta se retiró antes de introducirla en el portamuestras del microscopio. El cantiléver detecta el relieve de la película comparada con la del escalón.

Medidor de Efecto Hall

Las pruebas eléctricas realizadas a las muestras se hicieron por medio de un sistema de Efecto Hall marca ECOPIA modelo HMS-5000 (*ver Fig. 8.*), en donde la muestra tenía que ser ubicada entre cuatro puntos para poder iniciar a medir el paso de corriente, estas pruebas se hicieron sobre películas que habían sido depositadas sobre los tres distintos sustratos.

Análisis termogravimétrico (TGA)

La determinación de la pérdida de masa con respecto a la temperatura se realizó por medio de un Análisis Termogravimétrico (*ver Fig. 9.*) con un flujo de $100 \text{ cm}^3 \cdot \text{min}^{-1}$ de nitrógeno e igualmente con aire, iniciando en 30°C hasta 500°C , teniendo un tiempo de análisis de casi media hora cada muestra.

Resultados:

Como primera medida se realizó la parametrización del equipo (Sputtering) para poder depositar películas delgadas de nitruro de cobre, estableciendo los parámetros y condiciones adecuadas a las cuales se debe realizar la deposición con una perfecta formación del plasma, un excelente crecimiento de las películas y una buena adhesión de las mismas.

El potencial aplicado creaba el plasma el cual era encargado de ionizar el gas de arrastre (argón) y que este pudiera bombardear la superficie del blanco de cobre, y de esta manera soltara los átomos que serán depositados sobre el sustrato.

El gas de arrastre se mantuvo a un flujo de $15 \text{ cm}^3 \cdot \text{min}^{-1}$, ya que si se disminuía no se formaba el plasma, y además esta variable se dejó quieta para poder analizar los demás aspectos contribuyentes en la formación de las películas.

A medida que se aumentaba el flujo del gas precursor (nitrógeno) en el depósito, se notaba un cambio de coloración en las películas muy significativo, tal como se muestra en las siguientes imágenes:



Fig. 1. Deposito de Cu_3N 3/15 N_2/Ar (2 min)



Fig. 2. Deposito de Cu_3N 10/15 N_2/Ar (2 min)



Fig. 3. Deposito de Cu_3N 20/15 N_2/Ar (2 min)



Fig. 4. Deposito de Cu_3N 20/15 N_2/Ar (3 min)

A medida que se iba aumentando el flujo de nitrógeno, la película tornaba un color más plateado, dejaba ese color cobrizo que tenia para ir cogiendo un tono más brillante plata, esto se debe a que los átomos de nitrógeno van desplazando los de cobre.

Análisis de Espectroscopia Fotoelectrónica de Rayos X (XPS)

El siguiente espectro de baja resolución muestra los resultados obtenidos de la composición elemental de las cuatro muestras analizadas:

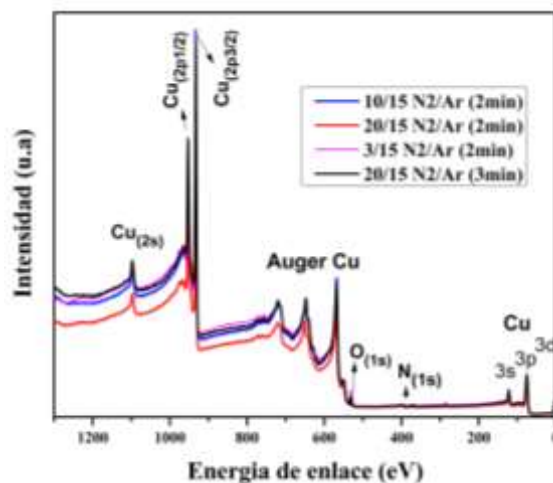
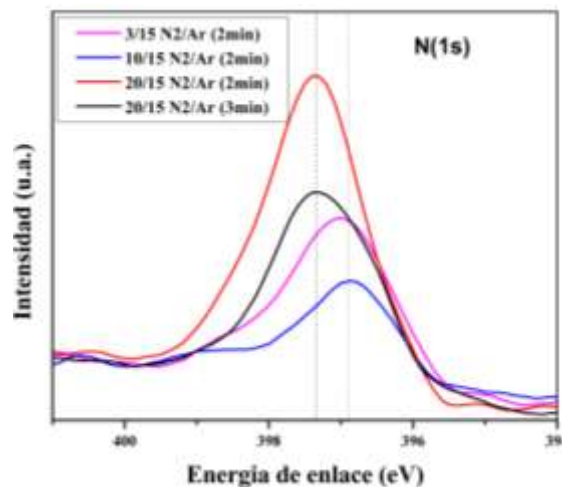
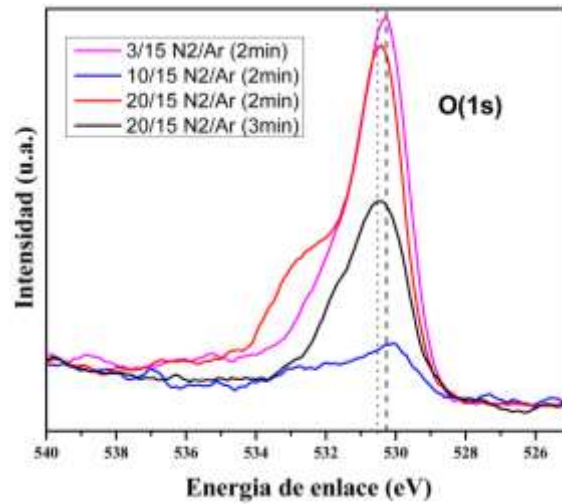


Fig. 5. Acoplamiento de cuatro espectros de alta resolución de XPS

Se encuentra una relación entre la concentración del elemento y la señal respectiva mostrada en el espectro, ya que son directamente proporcionales, además de ser cuantitativa, esto quiere decir que a medida que la señal sea más alta, habrá mayor concentración del elemento. Efectivamente la muestra con una relación 20/15 N₂/Ar (3 min), muestra una señal más grande y un poco más demarcada que las demás. Los espectros mostrados a continuación son de alta resolución:



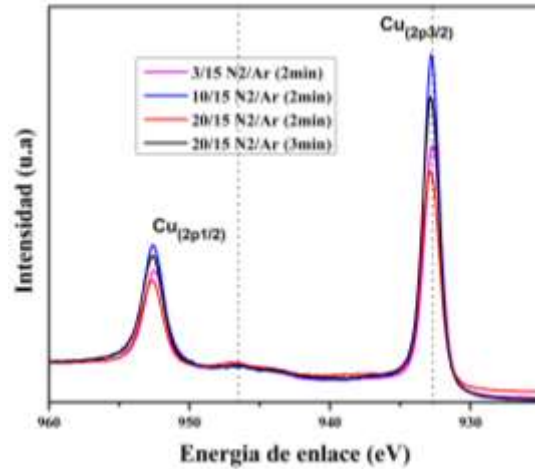


Fig. 8. Espectro de alta resolución para el Cobre

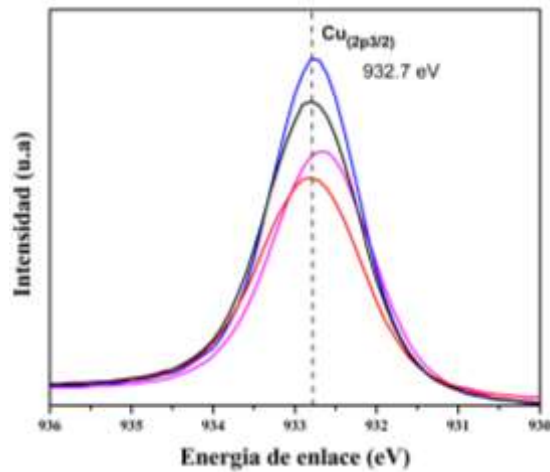


Fig. 9. Espectro de alta resolución para el Cobre en el pico más alto

A medida que el flujo de nitrógeno aumentó en el depósito de las películas, se observó la disminución de moléculas de cobre en el espectro, y cuando hay menor flujo de nitrógeno, da capacidad para que el oxígeno presente en la atmósfera reaccione con la superficie de la película y forme óxido de cobre.

Difracción de Rayos X (XRD)

La siguiente imagen muestra los resultados obtenidos a partir del análisis realizado a las cuatro muestras por medio de difracción de rayos X:

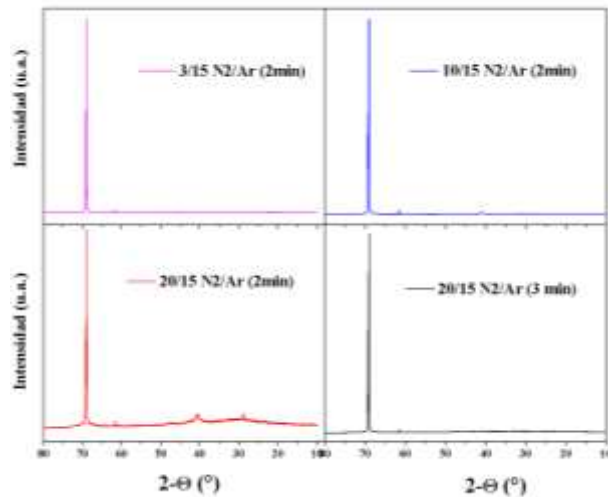


Fig. 10. Resultados de difracción de rayos X

La estructura cristalina fue determinada por el análisis de patrones de difracción de rayos X. En la Fig. 10. se pueden observar los patrones de difracción para las películas delgadas de Cu₃N sintetizadas a diferentes flujos de nitrógeno de 3, 10, y 20 cm³.min⁻¹. Estos patrones muestran que las películas están compuestas de cristales de Cu₃N, ya que es posible apreciar un sólo pico, el cual le corresponde al plano (111) correspondiente a un cubo. Estas muestran un crecimiento preferencial en los planos (111) independientemente del flujo de nitrógeno utilizado para hacer el depósito.

Microscopía Electrónica de Barrido (SEM)

Las siguientes imágenes muestran el resultado del espesor de las películas de nitruro de cobre, obtenidas por medio de microscopia de barrido electrónico:

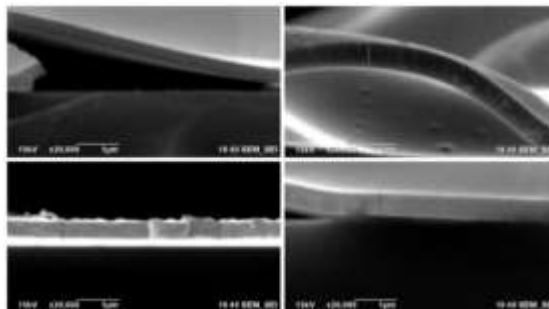


Fig. 11. Espesor de las películas, en aumento de nitrógeno de izquierda a derecha

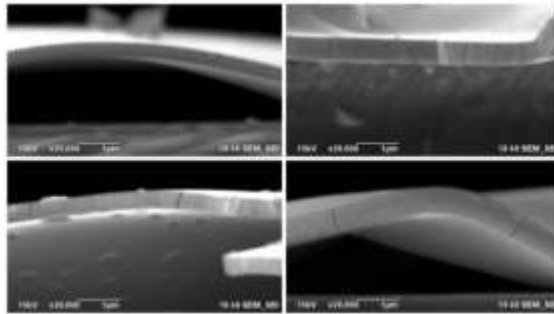


Fig. 12. Espesor de las películas, en aumento de nitrógeno de izquierda a derecha

Se obtuvieron resultados entre los 300-600 nm de espesor de las películas, teniendo en cuenta que al aumentar el flujo de N₂ se favorece el crecimiento de Cu₃N.

Microscopía de fuerza atómica (AFM)

Las siguientes imágenes muestran la topografía de las películas obtenidas desde el microscopio de fuerza atómica:

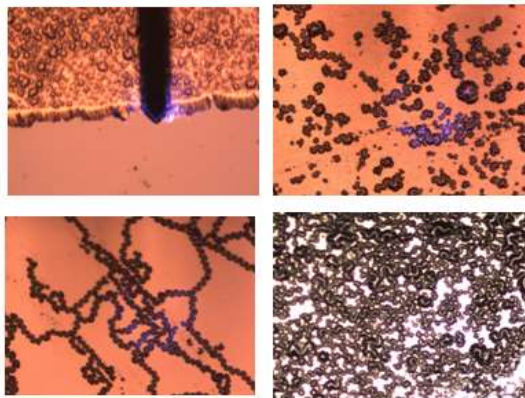


Fig. 13. Superficie de las películas, en aumento de nitrógeno de izquierda a derecha

Se obtuvieron resultados entre los 300-600 nm de espesor de las películas, teniendo en cuenta que al aumentar el flujo de N₂ se nota un conglomerado más compacto de partículas el cual se hace aún mas espeso cuando se usa un tiempo de deposición de tres minutos.

Sistema de emisión de efecto Hall

Relación Deposito de Cu ₃ N	Tiempo	Coficiente Hall
3/15 N ₂ /Ar	2 min	1.263E ⁻⁰⁴
10/15 N ₂ /Ar	2 min	-3.776E ⁻⁰⁴
20/15 N ₂ /Ar	2 min	-8.901E ⁻⁰⁴

Se destaca que a un menor flujo de gas precursor el coeficiente Hall es positivo esto quiere decir que la conducción eléctrica se esta dando por huecos, pero una vez empieza a variarse y a aumentar el flujo de este mismo la conducción eléctrica empieza a darse por medio de electrones, esto quiere decir que el portador de carga que empieza a demarcar puntualmente las muestras son los electrones.

Análisis termogravimétrico (TGA)

El análisis de la muestra esta empezó a mostrar una descomposición del material cercana a los 200°C correspondiente a la temperatura de descomposición del nitruro de cobre reportado en la literatura.

Referencias Bibliográficas:

Aguilar, M., (2001). Bioelectromagnetismo: Campos eléctricos y magnéticos y seres vivos. Madrid – España.

Cortes, H.; Martínez, P.; Valencia, H. (2006). Fundamentos de Cristalografía. Editorial Elizcom. Quindío – Colombia. Pág. 79.

Kim, K. J., Kim, J. H., & Kang, J. H. (2001). Structural and optical characterization of Cu

P. J. Kelly, (2000). Magnetron sputtering: a review of recent developments and applications. Disponible en: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0042207X9900189X>.

Seymour, R.; Carraher, C. (1995). Introducción a la Química de los Polímeros. Editorial Reverté, S.A. Barcelona – España. Pág. 169.

Tortora, G.; Funke, B., Case, C. (2007). Introducción a la Microbiología. Editorial Médica Panamericana. Novena edición. Madrid – España. Pág. 66

Universidad Autónoma de Madrid. (2008). Unidad de análisis térmico. Disponible en: http://www.uam.es/ss/Satellite/es/1242668322022/1242666562032/UAM_Laboratorio_FA/laboratorio/Laboratorio_de_Analisis_Termico.htm.

Universidad Nacional Autónoma de México. Disponible en: http://www.cnyn.unam.mx/index.php?option=com_content&view=article&id=246&Itemid=297&lang=en

Vázquez, G., Echeverría, O. (2000). Introducción a la microscopia electrónica aplicada a las ciencias biológicas. México D.F. Pág. 123-124.

Síntesis y caracterización de catalizadores de Paladio, piridilchalconas, y evaluación en la reacción de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck entre yodobenceno y estireno en medio acuoso.

Tipo / Estado del proyecto: terminado

Propuesta: Utilizar ligandos N-heterociclos tipo chalcona para suplir el manejo de ligandos tóxicos como los ligando fosfina.

Nombres y apellidos de los ponentes (máximo dos): Elkin Alexis Sánchez Yocué

Correo electrónico de contacto: easanchezy@uqvirtual.edu.co

Institución: Universidad del Quindío

Programa: Departamento de Química

Semestre: VIII

Nombre del tutor del proyecto: Fernando Cuenú Cabezas, Edwar Cortes Gonzalez

Resumen ejecutivo del trabajo:

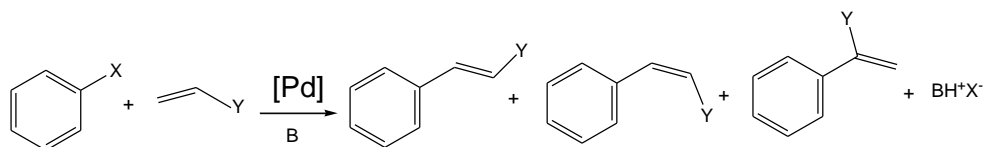
En éste proyecto de investigación, se pretende realizar reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck entre diversas olefinas aromáticas y haluros de arilo con complejos de paladio conteniendo ligandos N-heterociclos, derivados de piridin-chalconas y nitropirazoles, esto se realiza con el fin de proponer otro tipo de ligandos diferentes a los comunes ligandos fosfinados, que a pesar de ser excelentes características, presentan inconvenientes medioambientales y de estabilidad cuando se trabaja a altas temperaturas.

Resumen: En este trabajo se reporta la síntesis y caracterización de complejos de paladio tipo $[PdCl_2(N-het)_2]$, donde los *N-het* son derivados piridin-chalcona (*E*)-1-(2-aminofenil)-3-(piridin-4-il)prop-2-en-1-ona (**1**) y (*E*)-1-(2-aminofenil)-3-(piridin-2-il)prop-2-en-1-ona (**2**). Así como su evaluación catalítica, analizando el efecto del medio acuoso en que se realizó la reacción y de la posición del Nitrógeno piridinico sobre las donaciones de carga Ligando-Metal en reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki Heck entre yodo benceno y estireno Obteniendo catalizadores resistentes a una temperatura elevada (120°C), ecoamigables presentando rendimientos aceptables al someterlos a una disminución de la concentración de DMF. Además, los ligandos se comportan como un excelentes donores σ y malos aceptores π . Los datos espectroscópicos son consistentes con la coordinación de las piridil-chalconas a través del nitrógeno piridinico y no por el nitrógeno de la

Palabras clave (máximo 5) Catálisis, Mizoroki Heck, Iminas, Medio Ambiente

Introducción:

La arilación y vinilación de alquenos con aril o vinil haluros fue descubierta independientemente por Heck [1] y Mizoroki [2], ahora es conocida universalmente como la reacción de Heck. La reacción de Mizoroki-Heck, trata de la formación de nuevos enlaces C-C (ver esquema 1).



B= Li₂CO₃, Na₂CO₃, Cs₂CO₃, NaHCO₃

Y= Ph, OR, COOR

X= Cl, Br, I, COCl, OSO₂CF₃

Esquema 1.

Una de las desventajas de los anteriores sistemas catalíticos es la precipitación de paladio (paladio negro, ver figura 1), el cual limita el tiempo de vida de la especie activa, debido a la formación de un sedimento metálico inactivo. Ésta desventaja fue solucionada con la adición de fosfinas labiles y hemilabiles, las cuales previenen la clusterización del metal, aumentando así la estabilidad del sistema, pero al adicionar un pequeño exceso del ligando fosfina se inhibe la reacción [3].

Objetivos generales: Sintetizar y caracterizar los complejos de paladio, chalconas *N*-heterociclos, y su evaluación en la reacción de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck de Yodobenceno y Estireno, en medio acuoso.

Objetivos específicos: Sintetizar y caracterizar los ligandos:

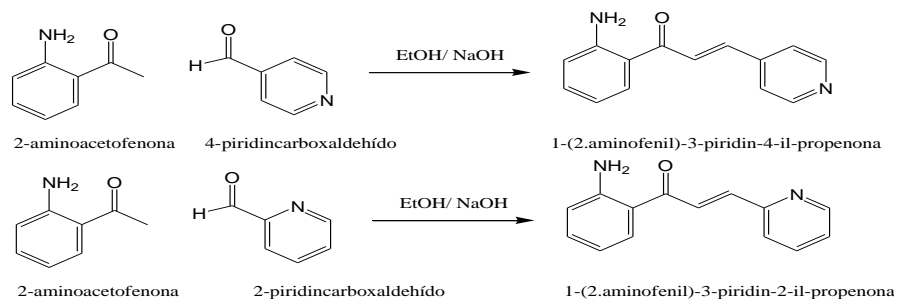
- **(1):** (*E*)-1-(2-aminofenil)-3-(piridin-4-il)prop-2-en-1-ona.
- **(2):** (*E*)-1-(2-aminofenil)-3-(piridin-2-il)prop-2-en-1-ona

Coordinar las iminas (1) y (2) a $[Pd(CH_3CN)_2Cl_2]$.

Evaluar la actividad catalítica de los complejos de paladio, chalconas *n*-heterociclos en las reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck de Yodobenceno y estireno en medio acuoso.

Síntesis de los ligandos:

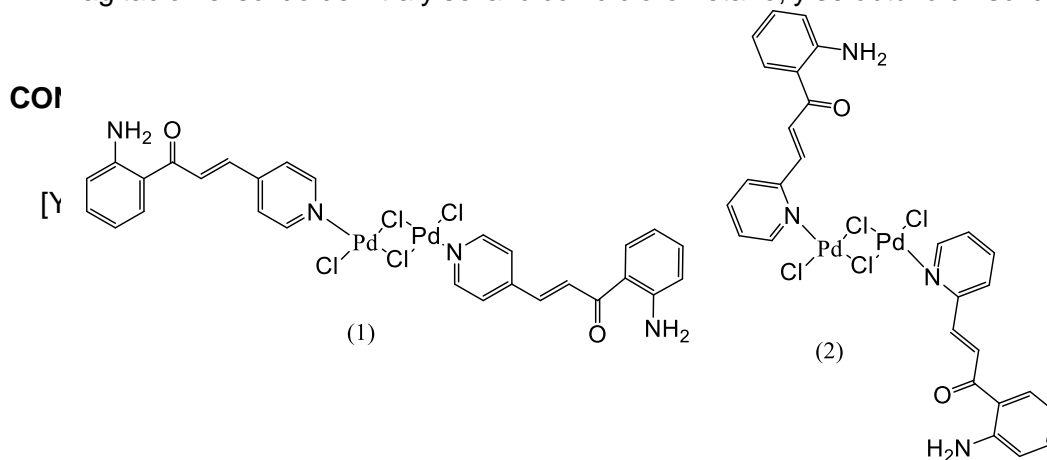
Los compuestos se sintetizan usando una reacción de condensación aldólica tipo Claisen-Schmidt, entre 2-aminoacetofenona y 2-piridilcarboxaldehído o 4-piridilcarboxaldehído; en un erlenmeyer de 200 mL se adiciona 1.5 mL (12.38 mmoles) de 2-aminobenzofenona, luego se adiciona 1.2 mL (12.75 mmoles) de 2-piridilcarboxaldehído o 4-piridilcarboxaldehído y 0.5 mL de una solución de hidróxido de sodio al 20%. La solución se deja en agitación a temperatura ambiente por 24 horas. Obteniéndose un sólido, que se lavan con etanol y agua (5:1), luego se secan al vacío.



Esquema 2. Síntesis de aminopiridil-chalconas

Síntesis de los complejos

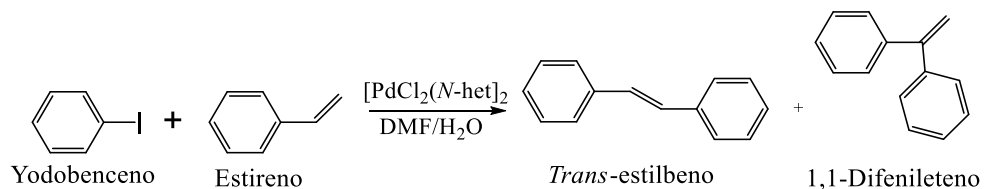
Se pesó 53.8 mg 0.240 mmoles de (1), se disolvió en metanol (1 mL) y se adicionó a una solución de 35.6 mg (0.138 mmoles) de $[\text{PdCl}_2(\text{CH}_3\text{CN})_2]$ (amarillo) disuelto en 3 mL de metanol. La solución translúcida inicialmente presenta un color naranja oscuro y después de 15 minutos de agitación a temperatura ambiente en atmósfera de nitrógeno, cambió a café-amarillo y se observó la formación de un sólido de color café-rojizo, después de dos horas de agitación el sólido se filtra y se lavó con diclorometano, y se obtuvo un sólido café-rojizo claro,



Esquema 3. Complejos de paladio sintetizados

Reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck

Después de la caracterización de los complejos, se realizaron estudios de actividad catalítica en reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck, entre el yodobenceno y estireno como se muestra en el esquema 4.



Esquema 4. Catálisis coordinación C-C tipo Mizoroki Heck

- [1] R.F. Heck, *Acc. Chem. Res.* 12 (1979) 146–151.
- [2] (a) T. Mizoroki, K. Mori, A. Ozaki, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 44 (1971) 581; (b) Y. Wang, J. Luo, Z. Liu, *J. Organomet. Chem.*, 739, (2013), 1.
- [3] H.A. Dieck, R.F. Heck, *J. Am. Chem. Soc.* 96 (1974) 1133
- [4] G. P. F. van Strijdonck, M. D. K. Boele, P. C. J. Kamer, J. G. de Vries, P. W. N. M van Leeuwen, *Eur. J. Inorg. Chem.* (1999) 1073
- [5] (a) R. A. Gossage; H. A. Jenkins; P. N. Yadav *Tetrahedron Lett.* 45 (2004) 7689; (b) C. R. Eisnor; R. A. Gossage; P. N. Yadav *Tetrahedron* 62 (2006) 3395; (c) S. Haneda; C. Eda, K. M. Hayashi, *Adv. Synth. Catal.* 349 (2007) 833; (d), K. R. Reddy; G. Ueba *Tetrahedron Lett.* 46 (2005) 661; (e) X. Cui; Y. Zhou; N. Wang; L. Liu; Q. X. Guo, *Tetrahedron Lett.* 48 (2007) 163. (f) S. Haneda; Z. Gan; K. Eda; M. Hayashi, *Organometallics* 26 (2007) 6551.

Análisis fisicoquímico de compost expuesto a campo magnético estático homogéneo

Nombres y apellidos de los ponentes (máximo dos): FERNANDO ANTONIO AREIZA VÉLEZ

Correo electrónico de contacto: areiza2002@utp.edu.co

Institución: Universidad Tecnológica de Pereira

Programa: Facultad de Ciencias Ambientales

Nombre del tutor del proyecto: Alexander Feijoo Martínez

Resumen ejecutivo del trabajo: Se sometieron residuos orgánicos domésticos procedentes de residencias del barrio El Poblado I de la ciudad de Pereira, Colombia, al estímulo de un campo magnético estático homogéneo para determinar el efecto de la estimulación física sobre la degradación del residuo. Para evaluar la respuesta se midió el índice de respirometría. En el diseño experimental se tuvieron en cuenta seis tratamientos y un control sobre los que se hicieron los análisis a los 13, 28, 42 y 55 días de iniciado el proceso de compostaje del residuo.

Resumen: Se evaluó el efecto de un campo magnético estático homogéneo sobre la degradación de residuo orgánico doméstico de la ciudad de Pereira, Colombia. El diseño experimental tuvo en cuenta la recolección del residuo a través de un plan de muestreo sin reposición en un barrio cuya población está estratificada mayoritariamente como Medio Bajo. Los factores de estudio fueron el tiempo de compostaje y el tratamiento; el primero consta de diferentes momentos para su evaluación (13, 28, 42 y 55 días) e indica los días en que se aplicó el tratamiento. Éste, resulta de la combinación de la densidad de flujo magnético (B) y el tiempo de exposición (t) del residuo al campo: 2 militesla (mT) con 5 minutos (min) de exposición, 2 mT 10 min, 4 mT 5 min, 4 mT 10 min, 6 mT 5 min y 6 mT 10 min. Se tuvo en cuenta un Control que no estuvo expuesto a ningún campo magnético experimental. La variable de respuesta que permitió evaluar y contrastar el efecto del campo magnético y su tiempo de aplicación sobre la degradación del residuo fue el índice de respirometría. Para la estimulación magnética se utilizó una bobina de Helmholtz de 240 vueltas que permitía un campo magnético estático homogéneo del 89.3 %. Los análisis de respirometría indicaron que la biodegradabilidad y la actividad metabólica en el sustrato orgánico responden diferencialmente al influjo de los factores de estudio. El Control y los tratamientos magnéticos 6 mT 5 min y 6 mT 10 min presentaron los índices más bajos, demostrando la formación de un compost más maduro y con un nivel de actividad fisicoquímica y de estabilidad biológica mayor que los demás tratamientos en el mismo tiempo. El hecho de que los tratamientos 2 mT 10 min, 4 mT 5 min y 4 mT 10 min hayan presentado los índices más altos, sugiere en ellos la ralentización del proceso, y por tanto, un nivel de estabilidad biológica y fisicoquímica menor. No se descarta inhibición en estos tratamientos. Los resultados ponen de manifiesto la importancia de formas alternativas de bioestimulación física para afectar la cinética de degradación de residuo orgánico doméstico, proceso mediado en gran medida por comunidades microbianas.

Palabras clave: Estimulación, campo magnético, residuo sólido, respirometría.

Introducción: La generación de residuos crece cada día y su aprovechamiento es mínimo (Bijaya et al., 2008). Para disponerlos, normalmente se tienen vertederos en las ciudades para almacenarlos. Aunque aparentemente es una opción barata, una ciudad como Montreal, de tres millones de habitantes, requerirá en el transcurso de 20 años un relleno de 840 ha con una profundidad de 15 m.

En América Latina, solo Sao Paulo produce diariamente más de 22.000 toneladas de residuos, que de acuerdo con las proyecciones necesitará de vertederos de mayor volumen que el anterior; en Colombia, Bogotá, Medellín, Cali y Barranquilla generan 11.275 ton/día, lo que equivale al 41% de los residuos del país. En las 28 ciudades capitales se acumulan 5.142 ton/día, equivalentes al 18.7% nacional, mientras que en los municipios restantes las cifras alcanzan las 11.083 ton/día, lo que corresponde al 40.3 % de los residuos de Colombia (Jaramillo y Zapata, 2008). En Pereira, una ciudad intermedia con casi 480.000 habitantes, se producen 149.735 toneladas anuales, para un promedio diario de 410. En los vertederos, las condiciones de mantenimiento son insuficientes e inadecuadas, ocupan terrenos que podrían estar destinados a áreas protegidas, a zonas con vegetación que ayuden a mitigar el calentamiento global, parques para la recreación, o con cultivos que permitan la seguridad alimentaria. Por el contrario, en ellos hay escorrentía de lixiviados que contaminan las aguas subterráneas, se producen gases de efecto invernadero, y además, proliferan insectos y enfermedades que limitan el aprovechamiento de estas zonas; por tanto, es importante pensar en nuevas alternativas de manejo de los residuos que permitan minimizar su impacto ambiental.

En este sentido, es indispensable desarrollar estrategias que traten eficientemente los residuos sólidos orgánicos, para convertirlos en material útil que haga innecesario el uso de rellenos sanitarios. En la mayoría de los países de América Latina y el Caribe, la cantidad de materia orgánica presente en los residuos sólidos urbanos supera el 50 %, pero solo 2 % recibe tratamiento adecuado para su aprovechamiento en producción de compost, lombricultivos, generación de biogás, incineración con producción de energía, e incluso alimentación animal (Jaramillo y Zapata, 2008). Si bien el funcionamiento de los vertederos a corto plazo, puede tener menores costos directos que la fabricación del compost, son más altos los costos ambientales a largo plazo (Atlas y Bartha, 2002).

Para Mohajer et al. (2010) el compostaje es un método sustentable de reciclaje de carbono con producción mínima de gases de efecto invernadero; el proceso, que se basa en la optimización de la capacidad de los microorganismos para biodegradar y estabilizar los residuos orgánicos, destruye patógenos y genera acondicionadores del suelo. De hecho, el compostaje de materiales con alto contenido orgánico y elementos minerales podría ayudar a restaurar la fertilidad del suelo (Castaldi et al., 2005). Su obtención se ve favorecida por la buena aireación, humedad adecuada y superficie de contacto del material.

Sin embargo, los microorganismos no degradan los residuos a unas velocidades lo suficientemente grandes por sus limitaciones de tipo metabólico que están mediadas en gran medida por condiciones ambientales como temperatura, humedad y aireación (Mohajer et al., 2010). Éstas, si no se controlan adecuadamente no estimulan el crecimiento. Las iniciativas cuya pretensión es la estimulación de microorganismos comprenden nuevas metodologías de cultivo que permitan variantes económicas, métodos que estimulen el crecimiento y vías acertadas para la inducción metabólica (Gómez et al. 2011). La exposición a campos magnéticos de microorganismos aislados o en enmiendas, es una forma de estimulación física que ha sido probada en los laboratorios. Se ha logrado

estimular cultivos de microorganismos entre gradientes magnéticos utilizando grupos de imanes (Mitsahuru y Kinoshita, 2003; Gómez et al., 2011; Zúñiga et al., 2011). Otros trabajos han evidenciado las interacciones y efectos de campos magnéticos y electromagnéticos a nivel celular (Miyakoshi, 2005; Cifra et al., 2011), tales como cambios en la actividad metabólica, efectos genotóxicos, apoptosis, alteración en el transporte de Ca^{2+} y orientación perpendicular de los microorganismos a un campo magnético.

Gómez et al. (2009) utilizaron con éxito una intensidad de campo de 0,03 T para promover el crecimiento y la división celular de la microalga clorofícea *Haemotococcus pluvialis*. Posteriormente, Gómez Luna et al. (2011) presentaron un estudio en el que se evaluó el uso del residual de la línea de ablandamiento del grano de soja como medio de cultivo para la microalga *Chlorella vulgaris*, obteniendo excelentes valores de densidad celular máxima con el mismo valor de intensidad de campo magnético. También, se ha observado que las radiaciones electromagnéticas incrementan los niveles de respiración celular, actividad citocrómica y ATP de algunos tipos de células (Huang et al., 2010).

En Colombia se han estudiado tipos de bacterias magnetotácticas que presentan migración hacia el polo norte magnético, y cuya aplicación práctica estaría relacionada con la producción de cristales magnéticos biogénicos (Morillo y Morales, 2007). Incluso, se estimuló con un campo electromagnético variable microorganismos presentes en cachaza y se permitió demostrar una mayor actividad microbiana y aceleración en la descomposición de la cachaza fresca (Zúñiga et al., 2011).

Objetivos generales: Evaluar la influencia y efecto de un campo magnético estático homogéneo en la transformación de residuos sólidos orgánicos.

Objetivos específicos: Determinar el efecto del campo magnético sobre la respirometría del residuo a través del tiempo de compostaje.

Evaluar el efecto del campo magnético sobre la respirometría del residuo de cada uno de los tratamientos

Metodología: Para la recolección del residuo se utilizó un plan de muestreo aleatorio sin reposición (Scheaffer, Mendenhall y Ott, 1987; Lagares y Puerto, 2001) que tuvo en cuenta el uso de tablas de Tamaño de Muestra y de Inspección Normal de la norma 'Procedimientos de Muestreo para Inspección por Atributos' (NTC-ISO 2859-1), y tabla de números aleatorios (Scheaffer et al., 1987).

El campo magnético fue generado con una bobina de Helmholtz de 240 vueltas, resistencia de 18 Ω , corriente máxima de 6 A y radio medio y máximo de 265 mm y 300 mm, respectivamente. Se alimentaba con una fuente de corriente directa DC Kepco ATE 75-15 M; para la medición de la densidad de flujo magnético dentro de la bobina se utilizó un teslámetro digital FW Bell 5170. La bobina consiste de un par de espiras concéntricas separadas y conectadas en serie donde el campo magnético (B) en una región homogénea es función de la corriente (I) y está dado por $B=\alpha I$; el valor de proporcionalidad (α) se obtiene experimentalmente por caracterización de la bobina (Torres et al., 2007). La estimulación magnética se efectuó a los 13, 28, 42 y 55 días después de iniciado el proceso de compostaje a las unidades experimentales que conforman los tratamientos. Para asegurar la exposición del residuo a un campo magnético homogéneo, el material orgánico se separaba en dos porciones equivalentes; a continuación, cada una se introducía en

recipiente cilíndrico de acrílico de 10.5 cm de diámetro y 10.0 cm de longitud (866 cm³), que posteriormente se alojaba dentro de la bobina. Como la distribución espacial de la densidad de flujo magnético varía dentro de una bobina (Wang et al., 2002), con las dimensiones del cilindro se aseguraba una zona de homogeneidad igual al 89.3 %.

El análisis, que es una medida fiable y reproducible, entrega puntos de referencia comparativos en la valoración de la actividad biológica de un material. Además de facilitar la obtención de datos sobre la producción de CO₂ en respuesta al metabolismo aerobio, su seguimiento histórico permite cuantificar de manera indirecta la actividad metabólica y establecer criterios de estabilidad o madurez del compost.

Los análisis de respirometría se realizaron siguiendo el procedimiento utilizado en los laboratorios del Grupo Interdisciplinario de Estudios Moleculares (GIEM) de la Universidad de Antioquia. Por este método, 20 g de muestra se humedecen al 60 % y se guarda en lugar aislado por 24 horas. Posteriormente, se incuba durante 24 horas dentro de un recipiente hermético en el que se tiene una solución acuosa de hidróxido de sodio 0.8 N. La titulación de dicha solución con ácido clorhídrico 0.4 N permite cuantificar la producción de bióxido de carbono como mg CO₂/g de muestra, utilizando la fórmula:

mg CO₂/g de muestra = $(V_B - V_M) \times N_{HCl} \times 22.005/P$, donde

V_B: volumen del blanco, ml

V_M: volumen de muestra, ml

N_{HCl}: normalidad del ácido, eq/L

P: peso de muestra húmeda, g.

Resultados: Se observó que el índice de respirometría disminuyó a través del tiempo en cada una de los tratamientos. De hecho, fueron mayores a los 13 días (1.14 y 2.62) y menores en el día 55 (0.22 y 0.61). Las diferencias significativas (p<0.05) se explican teniendo en cuenta las variaciones importantes que se dan en la concentración de nutrientes a lo largo del proceso. El factor que contiene información relativa a la densidad de flujo magnético (*B*) y el tiempo de exposición (*t*), evidenció diferencias significativas (p<0.05) de los tratamientos magnéticos con el Control. Los tratamientos 3 (0.53 a 2.33) y 4 (0.50 a 2.62) presentan los índices más altos; por el contrario, el Control (0.24 a 1.44) y los tratamientos 5 (0.22 a 2.19) y 6 (0.33 a 1.82) presentan los índices más bajos. No se descarta, teniendo en cuenta que la actividad microbiana es un reflejo de la degradación, que en éstos 3 tratamientos la pérdida de carbono y nutrientes haya sido más eficiente. Los valores de índice respirométrico de los tratamientos en cada uno de los tiempos evaluados se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1. Índices de respirometría de cada uno de los tratamientos en los tiempos de compostaje (mg CO₂/g de muestra)

Tratamiento	Días			
	13	28	42	55
1	1.41±0.012 ^{(a)A}	1.41±0.020 ^{(a)A}	0.94±0.031 ^{(a)B}	0.61±0.006 ^{(a)C}
2	2.07±0.012 ^{(b)A}	1.14±0.020 ^{(b)B}	1.05±0.031 ^{(a)B}	0.55±0.006 ^{(a)C}
3	2.33±0.012 ^{(c)A}	1.53±0.031 ^{(c)B}	0.99±0.023 ^{(a)C}	0.53±0.023 ^{(a)D}
4	2.62±0.020 ^{(d)A}	1.42±0.020 ^{(a)B}	0.69±0.012 ^{(b)C}	0.50±0.020 ^{(a)D}
5	2.19±0.031 ^{(e)A}	0.72±0.015 ^{(d)B}	0.79±0.026 ^{(c)B}	0.22±0.020 ^{(b)C}
6	1.82±0.010 ^{(f)A}	1.28±0.053 ^{(e)B}	0.63±0.010 ^{(b)C}	0.33±0.012 ^{(b)D}

Control	1.44±0.021 ^{(a)A}	1.41±0.012 ^{(a)A}	0.48±0.021 ^{(d)B}	0.24±0.020 ^{(b)C}
---------	----------------------------	----------------------------	----------------------------	----------------------------

Valores promedio y desviación estándar.

Valores con letras mayúsculas diferentes, presentan diferencias significativas ($p < 0.05$) entre los tiempos (Días) de compostaje (filas).

Valores con letras minúsculas diferentes en las columnas, presentan diferencias significativas ($p < 0.05$) entre los tratamientos en cada tiempo (Días) de compostaje.

Referencias Bibliográficas:

- Atlas, R; Bartha, R. (Ed.). (2002). Ecología microbiana y Microbiología ambiental. Madrid, España: Editorial Pearson.
- Bijaya, A; Barrington, S; Martínez, J; King S. (2008). Characterization of food waste and bulking agents for composting. *Waste Management* 28 (2008) 795-804.
- Castaldi, P; Alberti, G; Merella, R; Melis, P. (2005). Study of the organic matter evolution during municipal solid waste composting aimed at identifying suitable parameters for the evaluation of compost maturity. *Waste Management* 25 (2005): 209-213.
- Gómez, L; Menéndez, I. Álvarez; I. Flores. (2009). Efecto de diferentes protocolos de aplicación de un campo magnético (0.03 T) sobre el crecimiento, viabilidad y composición pigmentaria de *Haematococcus pluvialis* Flotow en suficiencia y ausencia de nitrógeno. *Biotecnología vegetal* 9 (2): 105-117.
- Gómez, L; Álvarez, I; Rivero, R. (2011). Cultivo de *Chlorella vulgaris* sobre residual de soja con la aplicación de un campo magnético. *Revista Colombiana de Biotecnología*. Vol. XIII No. 2. Diciembre 2011, pp 27-38.
- Huang Y. Y, Chen A. C, Sharma S. K, Wu Q, Hamblin M. R. (2010). Comparison of cellular responses induced by low level light in different cell types. *Progress in Biomedical Optics and Imaging*. San Francisco. Volumen 7552, artículo 75520^a.
- Jaramillo, G; Zapata, L.M. (2008). Aprovechamiento de los residuos sólidos orgánicos en Colombia (Monografía). Universidad de Antioquia. Facultad de Ingeniería. Medellín).
- Mitsuharu N y Kinoshita I. (2003). Medical Appliance KK. Method for culturing microorganisms for producing substance by using the microorganism, and method for decomposing substance by using microorganism. Publication number JP 2003159047. [Online]. Available: www.espacenet.com.
- Miyakoshi Junji. (2005). Effects of static magnetic fields at the celular level. *Progress in Biophysics and Molecular Biology* 87 (2005) 213-223.

- Mohajer, A; Tremier, A; Barrington, S; Teglia, C. (2010). Compost mixture influence of interactive physical parameters on microbial kinetics and substrate fractionation. Waste Management 30 (2010): 1464-1471.
- Morillo V, Salazar A, Márquez M, Morales A. (2007). Enriquecimiento de muestras con bacterias magnetotácticas para la síntesis de nanomagnétita biogénica. Scientia et Technica, número 36, pp 449-454. Universidad Tecnológica de Pereira.
- Zúñiga, O; Cuero, R; Peña, J. (2011). Estimulación con campo electromagnético variable de microorganismos benéficos aplicados a la cachaza para mejorar su uso como biofertilizante. Biotecnología en el Sector Agropecuario y Agroindustrial 9(2): 150-158.

Adsorción de Cromo y Plomo en Materiales Lignocelulosos

Nombres y apellidos de los ponentes (máximo dos): Jaime Andrés Parra Reyes
 Correo electrónico de contacto: jparrar@unicauca.edu.co

Institución: Universidad del Cauca

Programa: Química

Semestre: Decimo

Nombre del tutor del proyecto: Edier Humberto Pérez

Resumen ejecutivo del trabajo: El cromo y el plomo son metales altamente contaminantes para el medio ambiente y que por actividades antropogénicas han aumentado sus niveles, afectando principalmente aguas superficiales y por ende los seres vivos que las consuman. Para mitigar este impacto negativo, se estudió el efecto del residuo de la fibra vegetal de fique para adsorber estos metales y así poder evaluar su efecto como posible material para elaborar filtros. Los resultados encontrados muestran que la fibra de fique tiene una buena capacidad de adsorción de ambos metales, presentando una isoterma de adsorción tipo Freundlich (Multicapa) y una capacidad máxima de adsorción de 7,8109mg/g para cromo y 121,5346mg/g para plomo.

Palabras clave: Fique, Cromo, Plomo, Adsorción

Introducción: Los metales pesados son componentes naturales de la corteza terrestre que a altas concentraciones pueden llegar a contaminar al medio ambiente y por ende a todos los seres bióticos que lo conforman. El cromo y el plomo son dos de los metales más tóxicos y están presentes en el medio ambiente de forma natural (actividades volcánicas) y por acciones humanas asociadas a la industria (actividades antrópicas), cuyos residuos finalmente llegan a aguas superficiales que posteriormente son consumidas por las diferentes formas de vida. Para el tratamiento de efluentes contaminados con estos metales se han usado distintos procesos como la precipitación química, el intercambio iónico, procesos electroquímicos, entre otros; todos ellos con menor o mayor efectividad en la remoción. Si a lo anterior se añaden los costos de tratamiento hacen que estos procesos sean menos viables. Últimamente los procesos de adsorción con biomásas han llamado la atención por su capacidad de captación pasiva de iones metálicos, basados en las propiedades que tienen para enlazar y acumular este tipo de contaminantes por diferentes mecanismos asociados a sus componentes principales, lignina y celulosa.

Objetivos generales: Evaluar la adsorción de Cromo y Plomo en muestras de residuos de fibras vegetales provenientes del aprovechamiento industrial del fique para estimar su posible uso como filtro para aguas superficiales contaminadas con estos metales pesados. **Objetivos específicos:** Determinar el tiempo de equilibrio de adsorción de los metales con el residuo de fibra vegetal, determinar la capacidad de adsorción y fuerza de retención con que el residuo de fibra vegetal retiene el Cromo y Plomo mediante espectroscopia de absorción atómica.

Metodología: El residuo de fibra vegetal de fique se secó, molió y tamizó hasta un tamaño de partícula de 425µm, después de lo cual se determinó el tiempo de equilibrio de adsorción (8 réplicas a 50mg/L de cada metal), se agitó hasta 30 horas a 160 rpm en un agitador horizontal, tomando cada 2 horas una muestra del sobrenadante y analizar el contenido de los metales por espectroscopia de absorción atómica.

Para determinar la capacidad de adsorción de Cr y Pb en la fibra vegetal, se pesó 1 g de muestra vegetal y se adicionó soluciones de 20 a 100 mg/L de Cr y Pb. El estimado de la cantidad de metal adsorbido se estableció por la diferencia entre la concentración de metal suministrado y la concentración del metal que permanece en la solución una vez alcanzado el equilibrio.

Resultados: El tiempo de equilibrio de la fibra vegetal para los 2 metales se determinó en 12 horas. En los estudios de adsorción se determinó que el fique presenta una adsorción superior al 85% de cada uno de los metales estudiados, encontrándose que la isoterma de adsorción tiene un comportamiento de la ecuación de Freundlich lo que permite concluir que el proceso de adsorción es multicapa, donde se determinó una fuerza de retención para cromo y plomo 1,1997 y 0,2683, respectivamente y una capacidad de absorción de 7,8109mg/g para cromo y 121,5346mg/g para plomo.

Referencias: Tchounwou, Paul B.; Yedjou, Clement G.; Patlolla, Anita K.; Sutton, D. J. Heavy Metal Toxicity and the Environment. Molecular Clinical and Environmental Toxicology, EXS. 101, 133–164 (2012).

Kumari, M., Pittman, C. U. & Mohan, D. Heavy metals [chromium (VI) and lead (II)] removal from water using mesoporous magnetite (Fe_3O_4) nanospheres. *J. Colloid Interface Sci.* 442, 120–132 (2015).

Blázquez, G., Martín-Lara, M. A., Dionisio-Ruiz, E., Tenorio, G. & Calero, M. Evaluation and comparison of the biosorption process of copper ions onto olive stone and pine bark. *J. Ind. Eng. Chem.* 17, 824–833 (2011).

Watkins, D., Nuruddin, M., Hosur, M., Tcherbi-Narteh, A. & Jeelani, S. Extraction and characterization of lignin from different biomass resources. *J. Mater. Res. Technol.* 4, 26–32 (2015).

Salazar Valencia, P. J., Bolívar Marínez, L. E. & Pérez Merchancano, S. T. Molecular Modeling of Ammonium, Calcium, Sulfur, and Sodium Lignosulphonates in Acid and Basic Aqueous Environments. *Brazilian J. Phys.* 45, 567–574 (2015).

Síntesis y caracterización de complejos de Ni (II) y Co(III) soportados en ligandos N

Nombres y apellidos de los ponentes (máximo dos): Sebastian Díaz Serrano

Correo electrónico de contacto:
sebastian.diaz.serrano@correounivalle.edu.co
Institución: Universidad del Valle, Sede Yumbo

Programa: Tecnología Química

Semestre: Sexto

Nombre del tutor del proyecto: Álvaro Francisco De la Parra Morales; Gala de la Vega; Esperanza Galarza; John Jady Hurtado; Julián Patiño Rivera

Resumen ejecutivo del trabajo: Se sintetizaron dos ligandos (3,5-bis(1-H-6-nitroindazol)isoftalamida) 89.3% y (3,5-bis(1-H-6-nitroindazol)xileno) 75.3%; se realizó su respectiva caracterización. Posteriormente se coordinará a Ni (II) y Co (III) y se evaluará la posible actividad biológica frente a bacterias como *S. aureus* y *S. tiphy*

Resumen: La presente investigación tiene como objetivo sintetizar 2 nuevos complejos de níquel (II) y cobalto (III) soportados en ligandos pinza N-heterocíclicos como los azoles. Los ligandos obtenidos se han caracterizado parcialmente mediante diversas técnicas espectroscópicas como son RMN (^1H , ^{13}C), IR y espectrometría de masas (GC-MS). Actualmente el proyecto se encuentra en desarrollo y una vez se sintetizan los compuestos, se evaluará in vitro la actividad antibacteriana, tanto de los ligandos y complejos por separado, estableciendo la relación entre propiedades ácidas, actividad, estructura y entorno del centro metálico. Para la síntesis del ligando **1** (3,5-bis(1-H-6-nitroindazol)isoftalamida) se partió del precursor **A** (1,3-dicloroisoftaloilo) y del precursor **B** (6-nitroindazol) empleando dimetilformamida como disolvente y carbonato de potasio como base no coordinante en condiciones de reflujo, bajo agitación constante y en una atmósfera de nitrógeno obteniéndose sólidos de color café, y con un rendimiento del 89.3%. En cuanto a la síntesis del ligando **2** (3,5-bis(1-H-6-nitroindazol)xileno) se partió del precursor **A** (1,3-biscloroxileno) y del precursor **B** (6-nitroindazol) empleando dimetilformamida como disolvente y carbonato de potasio como base no coordinante en condiciones de reflujo, bajo agitación constante y en una atmósfera de nitrógeno obteniéndose un aceite de color marrón, y con un rendimiento del 75.3%.

Palabras clave: Síntesis orgánica, ligando pinza, níquel, cobalto, antibacteriana

Introducción: El tratamiento de las enfermedades infecciosas sigue siendo un problema importante y un desafío debido a una combinación de factores, como las enfermedades

infecciosas emergentes y el creciente número de microbios patógenos resistentes a múltiples fármacos. A pesar de que existen disponibles un gran número de compuestos antibióticos y quimioterapéuticos para uso médico, al mismo tiempo, la resistencia a los antibióticos en las últimas décadas ha revelado una necesidad sustancial de obtener nuevas clases de agentes antimicrobianos, que sean útiles en el tratamiento de enfermedades bacterianas resistentes [1]. Históricamente, la química inorgánica medicinal, rica en complejos de metales de coordinación, ha desarrollado compuestos para tratar este tipo de enfermedades, como por ejemplo compuestos como el de Paul Erlich, para el tratamiento de la sífilis. El área de la química bioinorgánica, se ocupa de estudiar el rol que los complejos metálicos desempeñan en los sistemas biológicos. Recientemente se han obtenido un número considerable de compuestos que son importantes desde el punto de vista biológico [2].

Objetivo general: Diseñar y evaluar la actividad antibacteriana *in vitro* de nuevos ligandos y complejos N-heterocíclicos de Co (III) y Ni (II).

Objetivos específicos: a. Desarrollar nuevos ligandos N- heterocíclicos donores y complejos de Co (III) y Ni (II) a partir de los ligandos.
b. Evaluar *in vitro* la actividad biológica de ligandos y los complejos como agentes antimicrobianos.

Metodología: Síntesis de Ligandos. La síntesis de ligandos se realizó mediante procedimientos reportados en la literatura, algunos fueron modificados y optimizados en el laboratorio. Se sintetizaron 2 ligandos. Para la síntesis del ligando **1** (3,5-bis(1-H-6-nitroindazol)isoftalamida) se partió del precursor **A** (1,3-dicloroisoftaloilo) y del precursor **B** (6-nitroindazol) empleando acetonitrilo como disolvente y la trietilamina como base no coordinante en condiciones de reflujo, bajo agitación constante y en una atmósfera de nitrógeno obteniéndose un aceite de color café. En cuanto a la síntesis del ligando **2** (3,5-bis(1-H-6-nitroindazol)xileno) se partió del precursor **A** (1,3-biscloroxileno) y del precursor **B** (6-nitroindazol) empleando tolueno como disolvente y la trietilamina como base no coordinante en condiciones de reflujo, bajo agitación constante y en una atmósfera de nitrógeno obteniéndose un aceite de color marrón. Para el desarrollo experimental de la caracterización se emplearon las técnicas espectroscópicas de infrarrojo, RMN (^1H , ^{13}C) mono y bidimensional, punto de fusión y espectrometría de masas.

Preparación de Complejos y Estudio *in vitro* de la actividad antibacteriana de ligandos y complejos. En desarrollo

Resultados: Hasta la presente fecha se han obtenido tanto los ligandos como los complejos por separado, se han caracterizado por técnicas espectroscópicas y se está evaluando actualmente su potencial biológico.

Referencias Bibliográficas: [1]. Hurtado, J; Quijada, Q; Rojas, R; Valderrama, M. Desmon Carey, Muñoz, A; Arratia, R; Guan Wu. (2009) Chromium(III) complexes with terdentate 2,6-bis(azolylmethyl)pyridine ligands: Synthesis, structures and Ethylene Polymerization behavior. *J. Organometc Chem.* 69, 2636-2641.

[2]. Hurtado, J; Quijada, Q; Rojas, R; Valderrama, M. Desmon Carey, Muñoz, A; Arratia, R; Guan Wu. (2010) Palladium(II) complexes bearing the new pincer ligand 3,5-bis(indazol-2-

Diseño y síntesis de nuevos análogos de Brasinoesteroides con actividad promotora del crecimiento vegetal

Nombres y apellidos de los ponentes (máximo dos): Karoll Ferrer Pertuz

Correo electrónico de contacto: karoll.ferrer.14@sansano.usm.cl

Programa: Universidad Técnica Federico Santa María

Semestre: Doctorado en Ciencias Mención Química

Nombre del tutor del proyecto: Luis Espinoza Catalán

Resumen ejecutivo del trabajo: La presente investigación está dirigida al diseño, síntesis y caracterización de nuevos análogos de brasinoesteroides a partir de productos naturales comercialmente disponibles. El objetivo principal se centra en la obtención de análogos activos en plantas de interés comercial a través de un diseño racional con la mejor relación costo sintético/actividad para fomentar su aplicación en la agricultura. Además, se espera que estos productos tengan propiedades fitoprotectoras contra diversos tipos de estrés biótico y abiótico. En éste último con real importancia en un problema actual de sequías que afectan a diversos cultivos nacionales, dados los cambios climáticos experimentados a nivel mundial y nacional.

Resumen: En el presente estudio, hemos empleado técnicas de diseño de fármacos basados en ligandos, 3D-QSAR, a través del análisis comparativo de campos moleculares (CoMFA) y el análisis comparativo de índices de similitud moleculares (CoMSIA) para determinar los factores estructurales claves en la actividad promotora del crecimiento vegetal de brasinoesteroides previamente reportados en la literatura, empleando el bioensayo de segundo internodo de frijol medido en dos grupos con diferentes concentraciones molares (10^{-9} y 10^{-10} M). La información obtenida en este estudio proporciona sugerencias útiles para ser usadas en el diseño exitoso y síntesis de nuevos análogos que podrían ser eventualmente explorados para identificar nuevos promotores del crecimiento vegetal con actividad biológica similar o mayor que los brasinoesteroides naturales, apoyados por los parámetros estadísticos obtenidos a partir de los análisis CoMFA (Modelo A, $r^2_{pred} = 0.751$; Modelo B, $r^2_{pred} = 0.770$) y CoMSIA (Modelo A, $r^2_{pred} = 0.946$; Modelo B, $r^2_{pred} = 0.923$), que muestran buena correlación y buen poder predictivo. La síntesis real de nuevos derivados está siendo llevada a cabo en nuestro laboratorio, a los que más adelante se les será examinado su actividad biológica.

Palabras clave: Brasinoesteroides, 3D-QSAR/CoMFA-CoMSIA, Síntesis Orgánica.

Introducción: Los Brasinoesteroides (BRs) son considerados una sexta clase de hormonas vegetales [1] promotores de crecimiento que exhiben un extenso espectro de efectos biorreguladores y anti-estrés, con amplias perspectivas de aplicación en procesos biotecnológicos y en agricultura. Una importante característica de los BRs es que ejercen su rol a concentraciones extremadamente bajas. Varios autores han observado que el tratamiento con BRs se caracteriza por estimular el crecimiento vegetal, aumentar el

rendimiento y la producción de biomasa en diferentes cultivos y acelerar la maduración de la cosecha, además de aumentar la resistencia de las plantas a plagas, insectos, hongos y a diferentes factores de "stress" como alta salinidad, sequia, bajas y altas temperaturas [2]. Aunque los BRs son encontrados en un incrementado número de especies de plantas, su más alta concentración en la naturaleza es solo de 0.1 ppm en el polen de *brassica napus* [3]. Debido a la baja concentración encontrada, la única fuente de estos compuestos es la síntesis química, con la cual se han producido BRs no presentes en la naturaleza. El 24-epibrasinólido que difiere del brasinólido tan solo en la configuración del grupo metilo en la posición 24, hoy es el más accesible y el más ampliamente utilizado brasinoesteroide. Sin embargo, este compuesto es todavía muy caro, alrededor de US\$ 90 por 5mg [3], Este excesivo precio limita su uso, incluso aunque su actividad es muy idéntica a la del brasinólido. Por éstas razones la búsqueda de nuevos BRs con una buena relación costo-bioactividad es un área activa para mejorar los beneficios de estos potentes reguladores de crecimiento vegetal en la agricultura. Las propiedades fisiológicas de los BRs, permiten considerarlos como sustancias naturales, altamente promisorias, apropiados para su uso hacia la protección de plantas y aumento en la producción agrícola. Siendo los BRs un tipo de hormonas no tóxicas y ambientalmente amigables [4]. Atendiendo a que los BRs son potentes reguladores de crecimiento vegetal y que pueden ser considerados buenos candidatos para mejorar el rendimiento de los cultivos así como superar estrés ambiental y lesiones de herbicidas y para controlar enfermedades patogénicas, no solo poseen la capacidad para incrementar la producción, sino también la calidad de las cosechas, a partir de dosis muy reducidas, que los hacen compatibles con las tendencias actuales orientadas hacia formas sostenibles y ecológicas de intensificación de la producción. Es por ello que, desde hace 25 años, se ha mostrado la aplicación práctica con óptimos resultados en diversas plantas cultivadas en campo, como arroz, trigo, cebada, maíz, lechuga, soya, algodón, tabaco, papa, mostaza, betabel, melón, cacahuete y arándano, entre otros.

Objetivo general: Sintetizar moléculas bioactivas, basadas en el desarrollo de un modelo 3D-QSAR a partir de productos naturales comercialmente disponibles.

Objetivos específicos: Diseñar modelos 3D-QSAR para la obtención de información relevante que permita predecir la actividad de nuevos análogos de brasinoesteroides. Sintetizar nuevos análogos de brasinoesteroides con potencial actividad biológica a partir un diseño racional con la mejor relación costo sintético-actividad. Caracterizar los nuevos análogos obtenidos a través de técnicas espectroscópicas como IR, MS, RMN mono y bidimensional. Determinar el efecto de la aplicación de análogos de brasinoesteroides en plantas de interés comercial para la evaluación de los modelos 3D-QSAR.

Metodología: Generación del modelo 3D-QSAR CoMFA/CoMSIA

Se seleccionó de la literatura disponible 53 análogos de BRs. Un conjunto de 27 moléculas con actividad biológica probada a 10^{-9} M (Modelo A) y un conjunto de 38 moléculas con actividad biológica probada a 10^{-10} M (Modelo B). Para la generación de los modelos 3D-QSAR (CoMFA y CoMSIA), la actividad promotora del crecimiento vegetal fue determinada a través del bioensayo del 2° internodo de frijol, mediante la medición de la longitud del segundo internodo en plántulas de frijol, con resultados presentados como mm de elongación para cada compuesto ensayado, que se extendió a través de un intervalo de 2.50-38.50 mm para el Modelo A y 0.80-54.80 mm para el Modelo B.

Los estudios CoMFA/CoMSIA fueron desarrollados usando el software de modelamiento molecular SYBYL-X 1.2 (Tripos Inc., St. Louis, MO, USA) ejecutados en una CPU Intel Core i7. Las estructuras minimizadas fueron superpuestas por el método de ajuste de átomos escogiendo el 24-Epibrasinólido como núcleo común de alineamiento.

Resultados: Los modelos 3D-QSAR fueron obtenidos por medio de análisis CoMFA y CoMSIA y sus parámetros estadísticos son informados en la **Tabla 1**. Por su parte, para el análisis CoMFA las contribuciones estéricas y electroestáticas fueron 28.2% y 71.8% respectivamente. Por otro lado, las contribuciones del análisis CoMSIA muestran una contribución estérica y electrostática de 8,1% y 27,4% respectivamente. Además, las contribuciones donora y aceptora de puente de hidrogeno fueron 27,0% y 19,5% respectivamente, mientras la contribución hidrofóbica fue de 18.1%.

Tabla 1. Parámetros estadísticos de los modelos CoMFA y CoMSIA de BRs.

CoMFA BRs								% Contribución	
N	q ²	r ²	SEE	F	PRESS	SD	r ² _{pred}	Estérica	Electroestática
3	0,81	0,968	0,041	221,25	0,1446	0,628	0,77	28,2	71,8

CoMSIA BRs								% Contribución				
N	q ²	r ²	SEE	F	PRESS	SD	r ² _{pred}	Estérica	Electroestática	Hidrofobica	Donor	Aceptor
9	0,7	0,998	0,014	755,591	0,1433	0,834	0,828	8,1	27,4	18,1	27,0	19,5

N: número óptimo de componentes; q²: el cuadrado del coeficiente de validación cruzada (VC) LOO; r²: el cuadrado del coeficiente no CV, r²_{pred}: r² predictivo basado solo en las moléculas del “test set”; SEE: error estándar de la estimación del análisis no CV; SD: suma de las desviaciones al cuadrado entre la actividad biológica de las moléculas en el “test set” y la actividad promedio de las moléculas del “training set”; PRESS: La suma de la desviación cuadrada entre la actividad biológica predicha y la real para cada moléculas del “test set” y F: valor del F - test.

La representación del valor del Log de la actividad predicha versus la experimental para los análisis CoMFA/CoMSIA es mostrada en las **Figura 1** y **2**, en la cual la mayoría de los puntos se encuentran bien distribuidos a lo largo de la línea Y=X, sugiriendo que el modelo 3D-QSAR es de buena calidad.

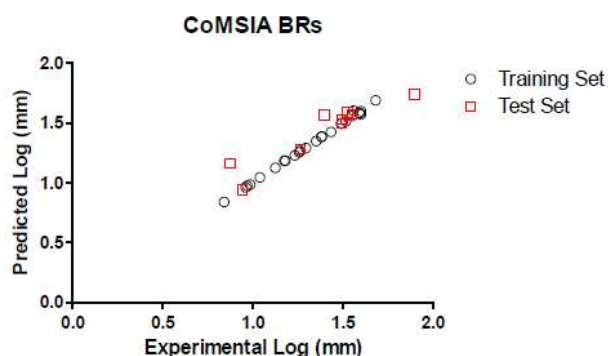


Figura 2. Actividad experimental versus actividad predicha para el análisis CoMSIA de BRs.

Los mapas de contorno para los análisis CoMFA/CoMSIA fueron realizados para visualizar en 3D las regiones a las que es posible realizarles importantes modificaciones para mejorar la actividad biológica en el ensayo del 2° internodo de frijol. La interpretación de estos campos permite modificar ligandos con el objetivo de mejorar la afinidad de los análogos de BRs con su receptor. Para este estudio el compuesto más activo fue utilizado como ligando patrón en cada uno de los mapas de contorno de las **Figura 3 y 4**.

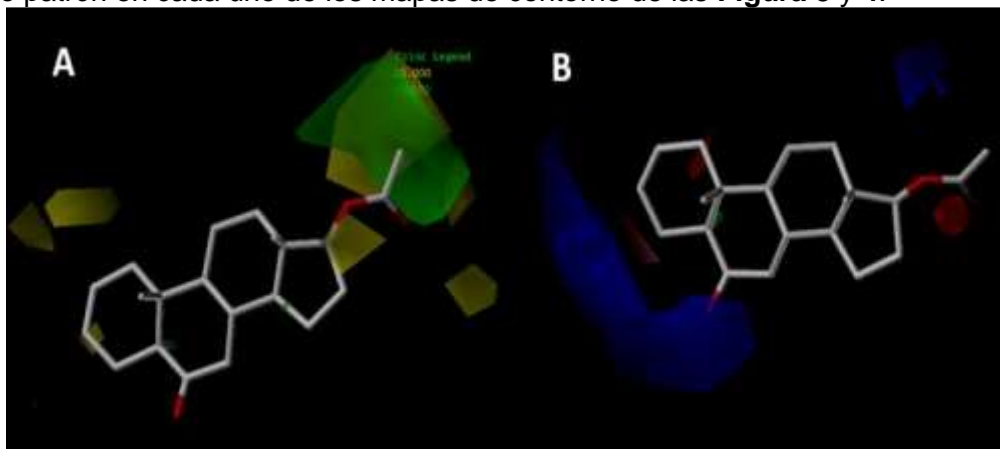


Figura 3. Mapa de contorno del modelo CoMFA de BRs **A.** estérico y **B.** electroestático, entorno al BR representativo más activo de la serie. Estéricamente favorecido (verde) y desfavorecido (amarillo); electropositivo (azul) y electronegativo (rojo).

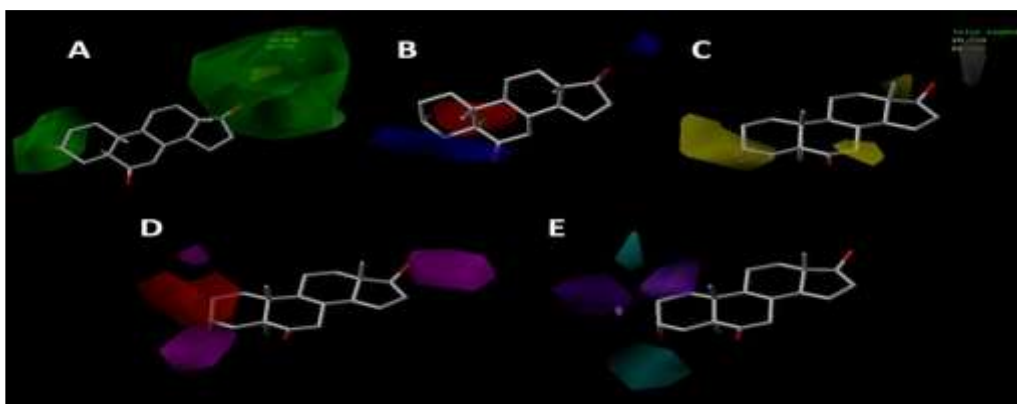


Figura 4. Mapa de contorno del modelo CoMSIA de BRs **A.** estérico, **B.** electroestático, **C.** hidrofóbico, **D.** aceptor de puente de hidrógeno y **E.** donador de puente de hidrógeno, entorno al BR representativo más activo de la serie. a. Estéricamente favorecido (verde) y desfavorecido (amarillo); b. Electropositivo (azul) y electronegativo (rojo); c. Hidrofólicamente favorecido (amarillo), hidrofílicamente favorecido (blanco); d. Donador de

punto de hidrogeno en el receptor mejora la actividad (magenta) o desfavorece (rojo); e. Aceptor de punto de hidrógeno en el receptor mejora la actividad (cian) o desfavorece (morado).

Referencias

- [1] Yokota, T.; *Trends Plant Sci.* **1997**, 2, 137-143.
- [2] Fujioka, S.; Sakurai, A.; *Physiol Plant.* **1997**, 100, 710-715.
- [3] Sisa, M.; Vilaplana-Polo, M.; Brosa, C.; Kohout, L.; *steroids.* **2007**, 72, 740–750.
- [4] Kang, Y.Y.; Guo, S.R.; Role of brassinosteroids on horticultural crops. In: Hayat, S., Ahmad, A. (Eds.), *Brassinosteroids: A Class of Plant Hormone.* Springer, **2011**. pp. 269–288.

Diseño y Construcción de un dispositivo de inmersión y de una celda electroquímica

Nombres y apellidos de los ponentes (máximo dos): Daniel Martínez

Correo electrónico de contacto: danymartinez112@hotmail.com

Institución: Universidad Santiago de Cali

Programa: Química

Semestre: Séptimo

Nombre del tutor del proyecto: Jimmy Alexander Morales Morales

Resumen ejecutivo del trabajo: Se realizó el diseño y construcción de un dispositivo de inmersión y una celda electroquímica, la elaboración del dispositivo de inmersión se divide en dos partes esenciales, la parte mecánica y la electrónica. La elaboración de la celda electroquímica se realizó a base de teflón y acrílico. Se lograron construir ambos equipos con un bajo costo y se encuentran en fase de evaluación.

Resumen: Se realizó el diseño y construcción de un dispositivo de inmersión y una celda electroquímica de bajo costo, para la realización del dispositivo de inmersión, se elaboró una tarjeta Arduino para controlar toda la parte electrónica y en la parte mecánica se utilizaron un motor paso a paso, engranajes y un tornillo sin fin. Para la realización de la celda electroquímica, se elaboraron dos placas de acrílico para sujetar el cuerpo de la celda el cual se fabricó en teflón, ya que permitirá realizar experimentos tanto en medios acuosos como no acuosos. Se lograron construir ambos equipos con un bajo costo y se encuentran en fase de evaluación.

Palabras clave: Inmersión, construcción, anticorrosivo, superficie metálica.

Introducción: Durante los últimos años, la preparación de materiales en forma de películas delgadas ha sido objeto de un gran número de investigaciones debido a su enorme interés tecnológico. La tecnología de obtención de películas delgadas de materiales de cualquier

naturaleza se puede decir que está muy avanzada. Esto se debe al enorme desarrollo que se está llevando a cabo en el campo de las técnicas de deposición. Estas son muy numerosas y la mayoría están desarrolladas por completo, existiendo una gran cantidad de trabajo experimental realizado en cada caso. Sin embargo, los enormes avances de la última década hacen cada vez más complicado satisfacer las demandas que exige el diseño de nuevos dispositivos. En este proyecto se propone una forma de obtener películas delgadas de tamaños apreciables a un bajo costo mediante la técnica de Dip Coating. Es por eso que el objetivo es diseñar y construir un dispositivo de inmersión. Paralelamente se diseñará y construirá una celda electroquímica de bajo costo para realizar estudios de propiedades electroquímicas de sustratos recubiertos.

Objetivos generales: Diseñar y construir un dispositivo de inmersión y una celda electroquímica de bajo costo.

Objetivos específicos: Diseñar y construir un dispositivo de inmersión que permita la elaboración de sistemas químicos protectores sobre superficies metálicas. Diseñar y construir una celda electroquímica que permita caracterizar propiedades anticorrosivas de sistemas químicos protectores sobre superficies metálicas.

Metodología: La elaboración del dispositivo se divide en 3 partes esenciales. En primer lugar, se encuentra la elaboración del lenguaje de programación, este se realizó en un lenguaje C++ y se utilizó un entorno llamado Dev-C++. En segundo lugar, se encuentra la fabricación de la tarjeta Arduino, por medio del software Eagle se realizó el diseño del circuito para esta tarjeta y se imprimió en un papel especial para que esta quedara en la baquelita, después de tener el circuito quemado en la tarjeta, se ubican los demás componentes en las perforaciones realizadas. Finalmente se realiza la base en acero inoxidable y con la ayuda de un tornero se realizan unos acoples en la parte mecánica de la estructura para unir el tornillo sin fin con el motor y que estos funcionen correctamente, además se fijan las balineras en la base de la estructura y se le agrega una placa en la parte superior, para que sostenga el motor y empate con una varilla de estabilidad y el tornillo sin fin. Se realiza un recubrimiento con acrílico para proteger el equipo y la tarjeta Arduino. Para el diseño de la celda electroquímica se elaboraron dos placas gruesas de acrílico con ayuda de una cortadora laser, estas placas hacen las veces de sujetadores del recipiente donde se encuentra la disolución con el arreglo de tres electrodos y electrolito de soporte. El cuerpo de la celda se realizó en teflón, ya que permitirá realizar experimentos tanto en medios acuosos como no acuosos.

Resultados: Se construyó un dispositivo de inmersión para la elaboración de sistemas químicos protectores sobre superficies metálicas. Se construyó una celda electroquímica para la determinación de propiedades electroquímicas de los sustratos metálicos recubiertos mediante el dispositivo de inmersión.

Referencias:

1. PREPARATION OF TITANIUM(IV) OXIDE THIN FILM PHOTOCATALYST BY SOL-GEL DIP COATING” R.S. Sonawane, S.G. Hegde M.K. Dongare, a Center for

Materials for Electronics Technology (C-MET), Panchwati, Pashan Road, Pune 411 008, India

2. DESARROLLO DE SISTEMAS FOTOACTIVOS TIO₂/FIBRA ÓPTICA” Scientia et Technica Año XIII, No 36, Septiembre 2007. Universidad Tecnológica de Pereira. ISSN 0122-1701
3. “DEPOSICIÓN DE UNA PELÍCULA DELGADA DE TIO₂ POR EL MÉTODO DE DIPCOATING” Mansor Abdul Hamid and Ismail Ab. Rahman, School of chemical Sciences, Universiti Saints Malaysia. “UM PROCEDIMENTO SIMPLES E BARATO PARA A CONSTRUÇÃO DE UM EQUIPAMENTO DIP-COATING PARA DEPOSIÇÃO DE FILMES EM LABORATÓRIO” Alfredo R. M. Oliveira e Aldo J. G. Zarbin -Departamento de Química, Universidade Federal do Parana

Evaluación de interferencias por hierro, manganeso y aluminio en la cuantificación de boro en solución mediante el método de absorción molecular.

Nombres y apellidos de los ponentes (máximo dos): Andrea Carolina Begambre Berrio*, Liz Karley Kerguelén Pacheco.

Correo electrónico de contacto: andreacbegambre@gmail.com*

Institución: Universidad de Córdoba

Programa: Química, Semestre: X

Nombre del tutor del proyecto: Enrique Miguel Combatt Caballero Ph.D

Resumen ejecutivo del trabajo: Este trabajo de investigación se planteó con el fin de evaluar las interferencias de Fe, Mn y Al en la cuantificación de boro en solución por el método de absorción molecular, ya que se suelen presentar sobreestimación en cuanto a la concentración real de boro en soluciones que presenten altas concentraciones de estos elementos. Se trabajó en una fase de laboratorio que consistió en preparar soluciones de boro a diferentes concentraciones, a las cuales se le agregaron diferentes concentraciones de Fe, Mn y Al. Posteriormente se realizaron las lecturas por colorimetría usando una solución buffer que contenía ácido tioglicólico y una solución de azometina-H en un espectrofotómetro UV-VIs a una longitud de onda de 420 nm.

De los resultados obtenidos se puede concluir que Mn y Al no interfieren en la cuantificación de boro, mientras que Fe es el principal causante de dicha sobreestimación en la concentración de boro en solución. Además se observó que a concentraciones mayores de 18 mg/L de Fe presentes en la solución, el ácido tioglicólico que se usa como complejante no consigue eliminar las interferencias que origina el Fe en la cuantificación de boro en solución.

Resumen: El boro (B) es un micronutriente esencial requerido por las plantas para su normal desarrollo y crecimiento, y los suelos constituyen la fuente de B para las plantas, el cual es absorbido a través de las raíces. Estos pueden ser divididos en dos tipos: aquellos con bajo contenido ($<40 \text{ mg kg}^{-1}$) o alto contenido ($>70 \text{ mg kg}^{-1}$) (Power y Woods, 1997); siendo los primeros los que componen la mayoría de los suelos en Córdoba y Costa Caribe; mientras que los últimos son aquellos próximos a sitios con actividad volcánica y geológica. El B absorbido por las plantas generalmente está controlado por sus niveles en la solución del suelo más que por su contenido total, representando usualmente alrededor del 10% disponible para las plantas. En la determinación de boro disponible en suelos ácidos, suelen presentarse interferencias causadas por hierro convirtiéndose en el principal inconveniente a la hora de su cuantificación por métodos como absorción molecular. Los resultados obtenidos mediante esta técnica analítica no son 100% reales, pues interfiere Fe, Mn, Al generando una amplia variabilidad en los valores obtenidos. Por tanto, nació la necesidad de evaluar el efecto de diferentes concentraciones de hierro, aluminio y manganeso en soluciones con diferentes contenidos de boro en solución, así mismo determinar la concentración a la cual el ácido tioglicólico no elimina la interferencia causada por este elemento. Este trabajo se está llevando a cabo en el Laboratorio de Suelos y Agua de la Universidad de Córdoba, donde se prepararon soluciones a diferentes concentraciones de boro 0.00, 0.18, 0.36, 0.72, 1.08 y 1.44 mg/L, posteriormente se les agregó diferentes concentraciones de Fe 0.00, 18, 54, 108, 162, 234 y 306 mg/L, Mn 0.00, 18, 36, 72, 144,

234 y 360 mg/L y Al 0.00, 18, 36, 54, 72, 90 y 108 mg/L a cada una de ellas. La cuantificación de boro se determinó por colorimetría en un espectrofotómetro GENESIS 20 a una longitud de onda de 420nm previamente establecida. Se encontró que Al y Mn no interfieren en la cuantificación de boro, mientras que Fe si causa dicha interferencia generando sobreestimaciones. De la misma manera, el ácido tioglicólico no logra eliminar esas interferencias a concentraciones mayores de 18 mg/L.

Palabras clave: Boro disponible, hierro, manganeso, aluminio, interferencias.

Introducción: El boro es un elemento fundamental en la tierra, generalmente se encuentra en forma oxidada como boratos o ácido bórico particularmente en océanos, rocas sedimentarias y algunos suelos (Ozturk et al., 2010). Además es un micronutriente esencial requerido por las plantas para su normal desarrollo y crecimiento (Malave, 2005). La determinación de este elemento en suelos por las técnicas como espectrotometría, potenciometría, cromatografía, espectrometría de absorción, emisión atómica de llama, emisión de plasma por inducción (ICP) y espectrofotometría de masa; se ve afectada por las interferencias causadas por la presencia de iones como Fe, Mn, Al, Zn.

En la cuantificación de B la técnica espectrofotométrica que utiliza una reacción colorimétrica de B con azometina-H, es el método de determinación de B más extensamente aplicado para muestras de suelo y de plantas, aunque los métodos colorimétricos, en general, sufren numerosas interferencias y tienen una deficiente sensibilidad y precisión (Sah et al., 1997).

Objetivo general: Evaluar el efecto de diferentes concentraciones de hierro, manganeso y aluminio en la cuantificación de boro mediante absorción molecular.

Objetivos específicos: Evaluar el efecto de diferentes concentraciones de hierro, manganeso y aluminio en soluciones con diferentes contenidos de boro.

Metodología: Se prepararon siete soluciones de boro a una concentración de 0.00, 0.18, 0.36, 0.72, 1.08 y 1.44 mg/L a partir de una solución patrón de 1000 mg/L, a cada solución se agregaron concentraciones de hierro de 0.00, 18, 54, 108, 162, 234 y 306 mg/L, cada una por separado. De igual manera, se prepararon con soluciones de boro a las concentraciones establecidas anteriormente, a las cuales se le adicionaron concentraciones de Mn de 0.00, 18, 36, 72, 144, 234 y 360 mg/L y así mismo, se procedió para las soluciones de boro con concentraciones de Al de 0.00, 18, 36, 54, 72, 90 y 108 mg/L. Posteriormente, de cada solución se tomaron cuatro (4) réplicas de 5 mL como alícuota y se transvasaron a vasos desechables, a la cual se le agregaron 2 mL de una solución buffer que contenía el ácido tioglicólico y 2 mL de una solución de azometina-H, agitando constantemente. Posteriormente se dejaron reposar durante 40 minutos y se realizó su lectura por espectrofotometría UV-Visible a una longitud de onda de 420 nm.

Resultados: El hierro presenta la mayor interferencia a la hora de cuantificar boro por el método de absorción molecular, mientras que el manganeso y el aluminio no interfieren en su determinación. Existe una sobreestimación en las concentraciones de boro en la determinación del mismo. El ácido tioglicólico usado en el buffer no es capaz de eliminar las interferencias de hierro en la cuantificación de boro.

Referencias: Ozturk, M., Sakcali, S., Gucl, S., y Tombuloglu, H. (Marzo, 2010) . Boron and Plants. Springer Science Business, 13, 1.
Malavé, A. (2005). Los suelos como fuente de boro para las plantas. UDO Agrícola 5 (1): 10-26

RESUMENES

MODALIDAD POSTER

P1. Estudio de interacciones supramoleculares de tres sales cuaternarias de amonio N-halometiladas.

Manuela López Arias, Luz Amalia Ríos Vásquez, Rogelio Ocampo Cardona, Rubén Tapasco, Universidad de Caldas.

Resumen ejecutivo del trabajo:

Se estudian las interacciones existentes en tres sales cuaternarias de amonio yodometiladas, las cuales se sintetizaron en la Universidad de Caldas y su posterior análisis cristalográfico se llevó a cabo en la Universidad Nacional Autónoma de México. El estudio de dichas interacciones se realizó usando el software libre Mercury.

Resumen:

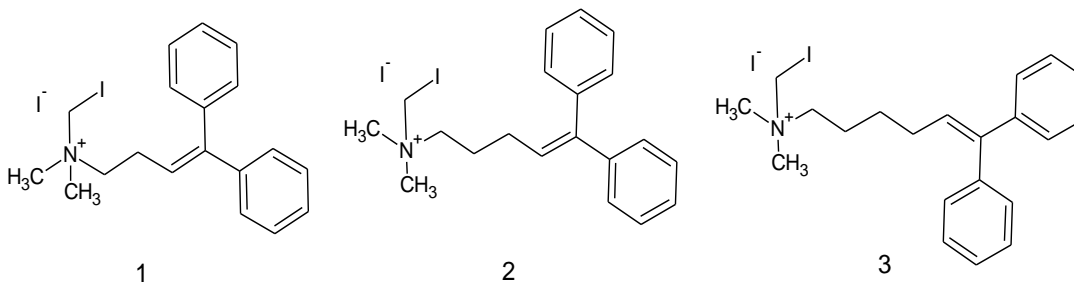
En este trabajo se analizan tres tipos de interacciones intermoleculares supramoleculares: enlace de halógeno tipo C-I...I-, enlace de hidrógeno tipo C-H...I- y C-H...□, que direccionan el empaquetamiento en la red cristalina de tres sales de amonio yodometiladas, yoduro de N-(4,4-difenil-3-buten-1-il)-N,N-dimetil-N-yodometilamonio **1**, yoduro de N-(5,5-difenil-4-penten-1-il)-N,N-dimetil-N-yodometilamonio **2** y yoduro de N-(6,6-difenil-5-hexen-1-il)-N,N-dimetil-N-yodometilamonio **3**. Sin embargo, no todas las interacciones están presentes en las tres sales.

Palabras clave: Interacciones, sales de amonio cuaternarias yodometiladas, Interacciones catión- π , enlace de halógeno C-I...I-, enlace de hidrógeno C-H...X-.

Introducción:

Mediante el estudio de las interacciones supramoleculares es posible visualizar la manera en que se unen las moléculas para formar sistemas supramoleculares usando interacciones o atracciones no covalentes (2-300 kJ/mol). Entre las interacciones no covalentes que son de interés para este estudio se tienen: a. Interacciones catión- π ,¹ b. Interacción C-H... π o enlaces de hidrógeno C-H... π ,^{2,3} c. Interacción tipo enlace de halógeno C-I...I-⁴ y d. Interacción tipo enlace de hidrógeno C-H...X-. Dado que el estudio de estas interacciones se constituye en una información de mucho valor para aproximarse al entendimiento de las interacciones entre moléculas farmacológicamente útiles y los sistemas enzimáticos, en esta ponencia se reporta el análisis de las interacciones supramoleculares en tres sales cuaternarias N-halometiladas con potencialidad como agentes terapéuticos contra enfermedades parasitarias, sintetizadas acorde con los procedimientos reportados en la literatura.⁵

Resultados:



Tipo de interacción de enlace	Compuesto 1	Compuesto 2	Compuesto 3
Enlace de halógeno intermolecular CH ₂ -I...I ⁻	3.564 (1) Å	3.506 (1) Å	3.557 (1) Å
C-H...I(2) Intermolecular	C(17)-H(17B) ^b ...I(2) = 3.000 Å	C(2)-H(2B)...I (2) = 3.06 Å	No existen
C-H...π Intermolecular Calculado al centro del centroide (Cg)	C(7)-H(7) ^e ...Cg = 2.84 Å	No existen	No existen

Tabla 1. Resumen de las interacciones moleculares de los compuestos 1, 2 y 3

De acuerdo con la tabla 1, se evidencia que las tres sales de amonio cuaternarias halometiladas **1**, **2** y **3**, presentan enlaces de halógeno tipo C-I...I-, lo que se explica por la teoría del agujero σ ,⁸ que se forma en el átomo de yodo que está enlazado al carbono del CH₂. De otra parte el compuesto **1**, es el único que presenta una interacción intermolecular tipo C-H... π y enlace de hidrógeno C-H...I⁻ al igual que el compuesto **2**, ambos compuestos tienen CH₂, que son donores de hidrógeno en la unidad catiónica. El compuesto **3**, es el único de los tres compuestos que no presenta interacciones C-H...I-, ni C-H... π .

Referencias:

- Dougherty, D. A. The cation- π interaction, *Acc. Chem. Res.* **2013**, 46(4), 885-893.
- Nishio, M.; Hirota, M.; Umezawa, Y., *The CH/ π Interaction. Evidence, Nature, and Consequences*; Wiley-VCH: New York. **1998**.
- Nishio, M. CH/ π hydrogen bonds in crystals, *Cryst. Eng. Comm.* **2004**, 6, 130–158.
- Huber, S. M.; Scanlon, J. D.; Jimenez-Izal, E.; Ugalde, J. M.; Infante, I., On the directionality of halogen bonding, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2013**, 15, 10350–10357.

P3. Síntesis e identificación de nuevos complejos de Ni y Co con el ligando 2,6-bis((6-nitro-1H-indazol-1-yl)metil)piridina

Johan Sebastián Aguilar Sepúlveda, Álvaro De la Parra Morales,
Universidad del Valle.johan.aguilar@correounivalle.edu.co

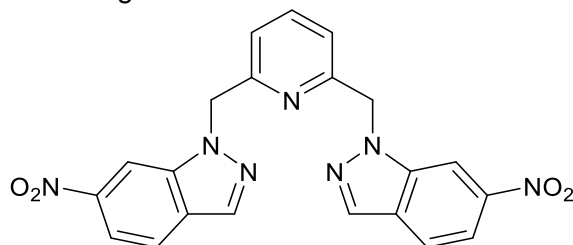
Resumen ejecutivo: Este trabajo presenta la síntesis de nuevos complejos organometálicos de níquel y cobalto con ligandos derivados de 2,6-bis((6-nitro-1H-indazol-1-yl)metil)piridina.

Resumen: La síntesis de este tipo de complejos se da a partir de la reacción de sales de Ni y Co con el ligando 2,6-bis((6-nitro-1H-Indazol-yl)Metil)piridina en metanol como solvente. La caracterización del ligando se hizo por espectroscopia de FT-IR, RMN mono y bidimensional, además por espectrometría de masas por impacto electrónico. Los complejos han sido caracterizados por medio de análisis elemental y por técnicas espectroscópicas de FT-IR, UV-vis, RMN ^1H y ^{13}C , además de análisis termogravimétrico en cual se identifica la naturaleza de las moléculas de agua en el complejo. Existe un registro bibliográfico el cual sustenta la actividad antibacteriana de este tipo complejos, por lo cual con este trabajo se busca encontrar complejos con este tipo de cualidades, además de enriquecer la química organometálica.

Palabras clave: Complejos, Pincer, Caracterización espectroscópica, actividad biológica.

Introducción: Los complejos pincer son la combinación ligandos orgánicos que contienen átomos donores y son capaces de ligarse en forma tridentada y un metal de transición, el tipo de unión con tres enlaces le genera estabilidad al nuevo complejo la cual se observa en parámetros físicos como por ejemplo la estabilidad térmica (puntos de descomposición superiores a 300°C).

El ligando 2,6-bis((6-nitro-1H-indazol-1-yl)metil)piridina tiene la siguiente estructura propuesta y representada en la gráfica 1:



Gráfica 1. Ligando pincer de estudio.

El ligando cuenta con tres pares de electrones libres dos de ellos provenientes de los dos grupos indazol y el otro del grupo piridínico, los cuales se han de coordinar a los metales Co y Ni. El impedimento estérico en este ligando limita el ingreso de otros grupos voluminosos lo que se sustenta en el análisis elemental donde se observa la relación 1:1 metal- Ligando, además el espectro de FT-IR presenta la banda débil Ni-Cl y Co-Cl a 330 cm^{-1} y 370 cm^{-1} respectivamente, además se observan las bandas asociadas al agua a 3333 y 3444 cm^{-1} respectivamente. Adicional a esto el análisis elemental permite determinar la presencia de un mol de agua en el compuesto.

Resultados:

Tabla 1. Aspectos relevantes de la caracterización ligando

Tipo de caracterización	Resultados más relevantes
Espectroscopia Infrarroja	Ausencia enlaces N-H Ausencia enlace H-O NO ₂ : 1521.84-1336.67 cm ⁻¹ CH ₂ : aprox 2850 cm ⁻¹
Espectrometría de masas	Ion molecular coincide con la masa esperada del ligando: 429 g/mol
RMN	El número de señales coincide con el número de protones esperados, algunas señales relevantes son Protones de etileno: 5.9-6.0 ppm Protones aromáticos: 7.2-8.7 ppm

Tabla 2. Aspectos relevantes de la caracterización de los complejos

Tipo de caracterización	Resultados más relevantes
Espectroscopia Infrarroja	Co-N: 425.11 cm ⁻¹ Ni-N: 442.87 cm ⁻¹ Ni-Cl: 330 cm ⁻¹ Co-Ni: 370 cm ⁻¹ O-H: 3067.36 cm ⁻¹
Análisis elemental	Los porcentajes experimentales coinciden con los esperados, prediciendo una molécula de cloro y una molécula de agua más en el complejo.
RMN	El estado de oxidación de los complejos Ni(II) y Co(III) los hace paramagnéticos lo que genera un espectro con baja resolución, sin embargo, se destacan muchas de las señales halladas en el espectro del ligando.

Referencias:

- Hurtado, J.; Ugarte, J.; Rojas, R.; Valderrama, M.; Carey, D. M.; Muñoz-castro, A.; Arratiapérez, R.; Fröhlich, R. "New Bis(Azolylylcarbonyl)Pyridine Chromium (III) Complexes as Initiators for Ethylene Polymerization. *Inorg. Chim. Acta* **2011**, 378 (1), 218–223.
- Hurtado, J.; Ibañez, A.; Rojas, R.; Valderrama, M. Palladium (II) Complexes Bearing the New Pincer Ligand 3,5-Bis(Indazol-2-Ylmethyl)Toluene; Synthesis and Catalytic Properties. *Inorg. Chem.* **2010**, 13 (9), 1025–1028.

P4. Análisis Experimental (DRX, FT-IR, UV-vis) y Teórico (HF, DFT) del 2-metoxi-N-(3-nitrofenil)benzamida.

Esteban García Torres, Dr. Rodolfo Moreno Fuquen, Universidad del Valle

Resumen ejecutivo del proyecto.

Se realizó la síntesis del compuesto 2-metoxi-N-(3-nitrofenil)benzamida a partir de la 2-metoxifenilalanina. Se sometió el producto cristalino a difracción de rayos X (mono-cristal). Se realizó un estudio supramolecular en estado cristalino. Se realizaron estudios teóricos paralelos de IR, UV-vis y un estudio de la superficie de contacto intermolecular por el método de Hirshfeld junto con las huellas dactilares de estas interacciones.

Resumen.

Un estudio estructural y supramolecular por Difracción de Rayos X (DRX) de la 2-metoxi-N-(3-nitrofenil)benzamida, mostró que este compuesto pertenece al sistema ortorrómbico, con grupo espacial Pbc_a. Este compuesto presenta ángulos diedros entre el segmento central C1-C7(O1)N1-C8 y los planos A y B de 2.9(1)° y 9.42(1)° respectivamente. El sistema presenta enlaces intra-moleculares de hidrógeno N1-H1...O2 y contactos cercanos intermoleculares de hidrógeno C13-H13...O4 y C14-H14...O4, que forman cadenas de moléculas C(7) a lo largo de la dirección [100]. Se realizaron estudios sobre el comportamiento de las superficies de Hirshfeld. Adicionalmente se complementaron los estudios con cálculos espectroscópicos teóricos que luego fueron comparados con los valores obtenidos experimentalmente.

Palabras claves: Difracción de rayos x, Hirshfeld, DFT.

Introducción: La síntesis y diseño de nuevos compuestos, plantea la búsqueda racional de propiedades en diversos sistemas moleculares, apoyándose en la Ingeniería Cristalina. Diferentes técnicas de análisis físico-químico pueden ayudar en la elucidación estructural de los productos de una reacción: Cromatografía de capa delgada (TLC), espectroscopias de IR, UV-vis, Raman, RMN o espectrometría de masas. Pero es la herramienta de difracción, entre ellas la difracción de Rayos X, la que permite “visualizar” de manera minuciosa y precisa el ordenamiento estructural tridimensional en el estado sólido. Esta técnica no destructiva de análisis, provee una información detallada de la unidad estructural “celda unitaria” de materiales cristalinos, que incluye las dimensiones de la celda, distancias de enlace, ángulos de enlace, ángulos de torsión, relaciones de simetría entre moléculas que hacen parte de la celda unitaria, ordenamiento y estructura conformacional, etc. Los datos generados por rayos X de monocristal, son interpretados y refinados para obtener la estructura cristalina correspondiente(1,2).

Resultados: Se obtuvo por medio de difracción de rayos x de monocristal toda la información estructural de la molécula, las distancias de enlace, ángulos de torsión, ángulos diédricos, tamaño y densidad de la celda unitaria, el grupo espacial, y la forma tridimensional de la molécula.

Tabla 1. Datos cristalográficos

Formula molecular	$C_{14}H_{12}N_2O_4$
Peso molecular	258.253 g/mol
Solvente de cristalización	Cloroformo
Sistema cristalino	Ortorrónico
a	15.6635(6) Å
b	7.3134(4) Å
c	22.6136(12) Å
Ángulos	$\alpha = 90.00 \beta = 90.00 \gamma = 90.00$
V	2590.5(2) Å ³
Z	8.00
Posiciones equivalentes	x, y, z -x, y-1/2, -z+1/2+1 x+1/2, -y+1/2+1, -z+1 x+1/2, +y, -z+1/2+1
Grupo espacial	Pbca
R	0.0504

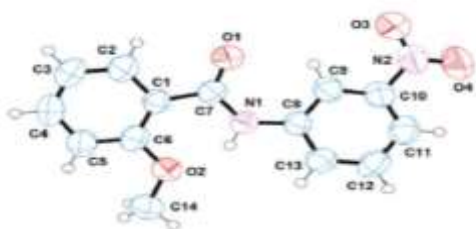


Figura 2. Estructura del 2-metoxi-N-(3-nitrofenil)benzamida

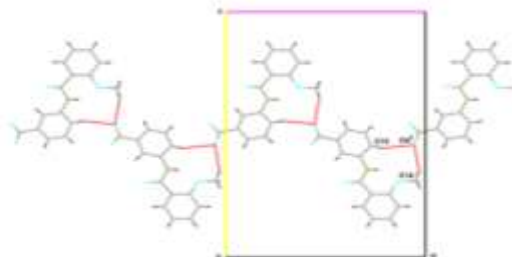


Figura 3. Crecimiento cristalino

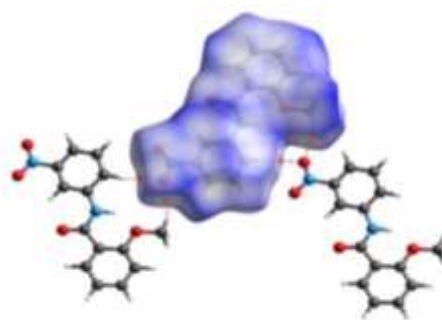


Figura 4. Estudio de las supramoleculares de la 2-metoxi-N-(3-nitrofenil)benzamida

Referencias.

- [1]. Saeed, A. and Simpson, J. 2-Chloro-N-(4-methoxyphenyl)-Benzamide. (2010). *Acta Cryst.* E66, o2963–o2964. doi: 10.1107/S1600536810043035
- [2]. Swamy, S. N., Manjunath, H. R., Priya, B. S., Basappa, Sridharb, M. A. & Rangappac, K. S. N-[4-Cyano-3-(trifluoromethyl)phenyl]-2-methoxybenzamide . (2011). *Acta Cryst.* E67, o198. *Acta Cryst.* (2011). doi: 10.1107/S1600536810050269

P5. Síntesis de iminopiridilpirazoles, coordinación a paladio, y actividad catalítica en las reacciones de acoplamiento c-c tipo mizoroki-heck

Dorancellly Fernandez Moreno, Fernando Cuenú Cabezas

Resumen: En el presente trabajo se realizó la síntesis del complejo de paladio, **[PdCl₂(1)]**, donde (1) es (*E*)-*N*-(3-(*tert*-butil)-1-(3-nitrofenil)-1*H*-pirazol-5-il)-1-(piridin-2-il)metanamina. El compuesto sintetizado fue caracterizado por técnicas espectroscópicas. La actividad catalítica del complejo de paladio **[PdCl₂(1)]** se evaluó en la reacción de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck entre diferentes haluros de arilo y estireno en medio acuoso, obteniendo así un catalizador amigable con el medio ambiente.

Palabras clave: *Imina, paladio, Heck*

Introducción: “Los compuestos que poseen el grupo imino RR'C=NR"reciben el nombre genérico de “iminas”^[1]. El carbono, al que se encuentra unido el nitrógeno con doble enlace, puede pertenecer a una cadena cíclica o acíclica. Si el hidrogeno iminico se sustituye por un radical alquilo o arilo los compuestos resultantes se denominan azometinas o bases de Schiff”^[2].

Las Iminas son usadas por sus propiedades antitumorales, antibacterianas, antimicótico entre otras.

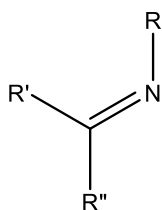
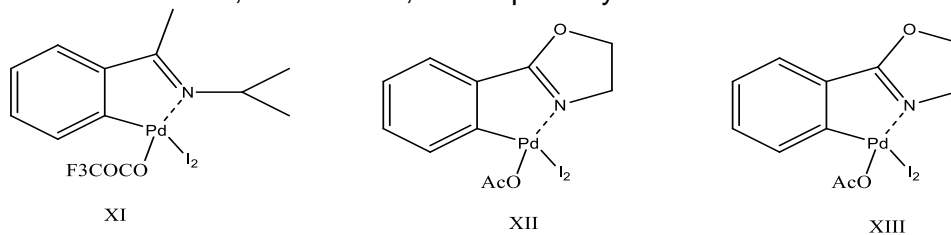


Figura 2. Imina

Las primeras aplicaciones de paladaciclos nitrogenados como catalizadores en reacciones de acoplamiento C-C fueron publicadas por Milstein y col. en 1999. En su primer trabajo describe cómo las iminas y oxazolinas orto-paladadas XI-XM (esquema 2) catalizan eficientemente el acoplamiento de yodo- y bromobenceno con acrilato de metilo en NMP (*N*-Metilpirrolidona) como disolvente y usando Na₂CO₃ como base a 140 °C. Se obtienen valores excelentes de rendimiento y de TON, llegando a 1.4x10⁶ para yodobenceno en 18 h y a 1.4x10⁵ para bromobenceno en 130 h. Aunque con rendimientos algo más bajos, también se acopla yodobenceno con olefinas menos convencionales para la reacción de Heck, como son el indeno, ciclohexeno, dihidropirano y dihidrofurano^[7].



Durante las últimas décadas, las reacciones Mizoroki-Heck más eficientes reportadas se llevaron a cabo en disolventes orgánicos y catalizadores de paladio con ligandos fosfinas; un gran inconveniente de la utilización de estos ligandos en tales reacciones catalíticas es la oxidación de la fosfina a un óxido de fosfina, así como la escisión del enlace P-M, causando la degradación del ligando, la reducción del metal y la terminación del ciclo catalítico además son tóxicas y costosas, por otro lado los disolventes orgánicos empleados en dicha reacción son poco amigables con el medio ambiente, por lo tanto se han hecho muchos esfuerzos para descubrir ligandos alternativos y disolventes que protejan el ecosistema pero sobre todo el agua^[2].

Resultados:

Existe alta actividad catalítica, esto es atribuido a la posición meta del grupo nitro en el anillo aromático (fenilo), ya que retira electrones del fenilo causando la desestabilización del carbocatión; por lo tanto, el electrófilo (anillo pirazólico) que se enlaza tendrá que donar menor densidad electrónica, caso contrario sucede con las orientaciones orto y para. Por tal razón habrá una mayor transferencia de carga del ligando hacia el metal favoreciendo así la donación σ (esto se ve reflejado en el desplazamiento de los protones de la piridina y la imina en el espectro RMN) y no la retrodonación π del paladio hacia el ligando, lo cual beneficia la captación de electrones para formar la especie catalíticamente activa de Pd^0 y la adición oxidativa, se evidencia que el complejo es regioselectivo y estereoselectivo debido a que los ligandos bidentados proporcionan un mayor impedimento estérico y una esfera de coordinación interna más estable es decir que los enlaces de coordinación entre los átomos de N y Pd no son lábiles; transcurrida las 24 horas de reacción no presentaba la formación del cluster de Pd^0 lo que demuestra que puede ser reciclado, es decir, puede agregarse más sustrato y continuar la reacción.

Los métodos empleados para la síntesis del ligando (*E*)-*N*-(3-(*tert*-butil)-1-(3-nitrofenil)-1*H*-pirazol-5-il)-1-(piridin-2-il)metanamina. y el complejo $[\text{PdCl}_2(1)]$ fue el adecuado puesto que los estudios espectroscópicos concuerdan con las estructuras planteadas

Como el ligante tiene la característica de poseer tres sitios activos para coordinarse al metal, a través del nitrógeno del grupo imino, por el nitrógeno del anillo de la piridina, y por el nitrógeno del anillo del pirazol, con base a los resultados obtenidos de los estudios espectroscópicos en el complejo formado, se pudo determinar la coordinación del metal con el nitrógeno de la piridina y el nitrógeno del grupo imino dicho acoplamiento es favorecido ya que la imina y la piridina son buenos donores σ de densidad electrónica, lo que demuestra que la transferencia de carga se ve favorecida hacia el metal; por lo anteriormente mencionado en los espectros RMN ^1H se ve el desplazamiento de los protones del anillo piridinico y de la imina a campo bajo.

Observando la actividad catalítica del complejo $[\text{PdCl}_2(1)]$ presentó una alta actividad catalítica, esto es atribuido a la posición del grupo nitro con respecto al anillo del pirazol.

El complejo sintetizado es regioselectivo gracias a que es un ligando bidentado lo cual proporciona un mayor impedimento estérico y una esfera de coordinación interna más estable, por lo tanto, será resistente a altas temperaturas y a la oxidación del metal.

Al emplear agua como solvente o al menos como un disolvente facilita la formación de la especie catalíticamente activa de Pd^0 , además, se disminuye la utilización de DMF, reduciendo de esta manera los efectos contaminantes de dicho solvente, no se necesitaría

de una atmósfera inerte y tampoco sería necesario secar los solventes antes de realizar las reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki – Heck.

Referencias:

[1]: J. Zheng, J. Li, H. Wei, J. Yu, H. Su, X. Wang. *Mater. Sci. Semicond. Process.*, 32. **(2015)**, 131-136.

[2]: K.C. Gupta, A.K. Sutar *Coord. Chem. Rev.*, 252 **(2008)**, 1420–1450.

[3]: K.K. Raja, N.I. Gandhi, L. Lekha, D. Easwaramoorthy, G. Rajagopal. *J. Mol. Struct.*, 1060 **(2014)**, 49–57.

P7. Modelamiento y Descripción estructural de la proteína PFO del lulo (*Solanum quitoense* Lam.) var. Castilla

Cristian Camilo Rocha Roa, Diego Alejandro Molina Lara & Clara María Mejía Doria,
Universidad del Quindío

Resumen ejecutivo: Se obtuvo un modelo 3D para la Polifenol oxidasa del lulo mediante modelamiento por homología, se evaluó su calidad y se realizó su respectiva descripción estructural y funcional por medio de herramientas bioinformáticas.

Resumen: La proteína polifenol oxidasa cataliza el fenómeno biológico denominado como pardeamiento enzimático, el cual genera pérdidas y cambios en la calidad de frutas y algunas verduras, causando enormes pérdidas económicas. Se identificaron residuos importantes en el sitio activo de la proteína, tales como H206, H223, H233, H362, H366, H406 encargados de coordinar los átomos de cobre, responsables de la actividad catalítica de la proteína, además del residuo C210, el cual mediante enlace covalente tioeter con H233 optimiza la capacidad catalítica de la proteína. El modelo predicho presento 58,7% de residuos en regiones favorables y 28,9% de residuos en regiones permitidas; presento además un valor para la puntuación QMEAN de 0,459, calificándolo como una buena aproximación a la estructura real de la PFO del lulo

Palabras clave: Polifenol oxidasa, Pardeamiento enzimático, Modelamiento por homología.

Introducción: El pardeamiento enzimático es el principal causante del deterioro de las propiedades organolépticas de las frutas, causando enormes pérdidas económicas para el sector agroindustrial Colombiano ^[1]; este pardeamiento está principalmente relacionado con la actividad de un grupo de enzimas llamadas polifenol oxidasa ^[2]. Por otro, los modelos proteicos estructurales aportan información valiosa para entender las funciones biológicas de las proteínas ^[3], además entrega información importante para iniciar estudios bioinformáticos de diseño de posibles inhibidores para regiones específicas de proteínas como la PFO del lulo.

Resultados: El análisis de la secuencia de la PFO del lulo de 641 aminoácidos reportada por Mejía-Doria *et al.* 2012 hecho con BLAST indicó que la proteína PFO de la berenjena (*Solanum melongena*) presenta el mayor porcentaje de identidad (58%), con una cobertura de 99%, junto con un E-value máximo de 0.0; Siendo esta el pariente más cercano reportado de la proteína PFO del lulo; Ninguna de las secuencias entregadas por BLAST presentan estructura reportada en el PDB. El análisis de dominios y motivos estructurales arrojó la presencia de 3 dominios presentes, Tirosinasa (F199–R418) catalogado como el dominio central de las PFO y Hemocianinas en plantas animales, fungí y bacteria, se le atribuye la síntesis de melanina (Melanogénesis), posee el centro catalítico de la proteína, el cual está formado por dos átomos de cobre, coordinados por dos grupos de tres Histidinas altamente conservadas en todas las PFO; PPO1_DWL (D426–K444) y PPO1_KFDV (F505 –T636) en cuanto a estos dos dominios, no hay documentado nada respecto a su funcionalidad, solo el hecho de versen involucrados en el proceso de proteólisis de la región C-terminal de la PFO, iniciando inmediatamente en el dominio

PPO1_DWL y seguido a esto se elimina un fragmento en el que está contenido el dominio ppo1_KFDV. La PFO del lulo presenta características claves como un punto isoeléctrico de 8.63, clasificación como hidrofílica (GRAVY:-0.415) sin la presencia de hélices transmembranales en su estructura y capacidad de ser termoestable (Índice alifático: 75.79). La proteína PFO del lulo presenta una estructura secundaria mayoritariamente de Loops (enrollamientos aleatorios), seguida por hélices alfa y láminas beta; presenta un total de 12 posibles hélice alfa y 13 posibles láminas beta. El modelo predicho por I-TASSER usando el template de la PFO con código PDB 4Z11 (*Coreopsis grandiflora*) presento un C-score: -1.21, TM-score: 0.56 ± 0.15 y RMSD: $10.7 \pm 4.6 \text{ \AA}$. Se identificaron cuatro hélices alfa ($\alpha 4$, $\alpha 5$, $\alpha 6$ y $\alpha 8$) que rodean al centro catalítico de cobre como está descrito para las PFO, además se ha encontrado que describen el sitio activo de las PFO como una esfera de carácter hidrofóbico. Se observaron dos grupos de láminas beta semiparalelos entre ellos ubicados en el extremo C-terminal de la estructura 3D, el primer grupo compuesto de 4 láminas antiparalelas y el segundo grupo compuesto por 3 láminas antiparalelas; dos grupos ubicadas en el parte final de la región C-terminal Se identificaron además en la estructura 3D los seis residuos de histidinas que coordinan a los dos átomos de cobre, H206, H223 y H233 para el CuA y H362, H366 y H406 para el CuB. Cabe mencionar que la actividad oxido-reductora de este tipo de proteínas está asociada a la acción de los átomos de cobre sobre los sustratos fenólicos, luego de haberse formado el intermediario *met* con el oxígeno molecular presente en el agua del material vegetal o la atmosfera. Se identificó el residuo Cisteína, C210, asociado a la optimización de la capacidad oxido-reductora de los átomos de cobre, el cual está unido covalentemente al segundo residuo de histidina del CuA por medio de un enlace tioeter. Basados en la clasificación de la comisión enzimática se establece que la proteína PFO del lulo posee una actividad catalogada como Oxidorreductasa, actuando sobre los compuestos fenólicos, pasando en primer lugar por una hidroxilación de monofenoles a difenoles, seguido por una oxidación de dichos difenoles a compuestos derivados o-quinonas. Además se establece un papel en procesos biológicos de melanogénesis (síntesis de melanina). Los ensayos de evaluación del modelo predicho para la PFO del lulo fueron positivos. Se obtuvo un valor para la puntuación QMEAN de 0,459 y un Z-score de -3-359. El gráfico de Ramachandran indicó que el 58.7% de los aminoácidos están en regiones favorables, 28.9% en regiones permitidas, 8.3% en regiones generosamente permitidas y solo el 4% en regiones no permitidas. El modelo predicho presenta un ambiente químico característico de proteínas PFO, siendo un buen comienzo para un inicio de diseño de inhibidores de su sitio activo. Se postula el bolsillo hidrofóbico en el que se encuentran los átomos de cobre como blanco para iniciar estudios de docking molecular.

Referencias: [1] Suárez, P., Andreu, A., Colman, S., Clausen, A. & Feingold, S. (2009). Enzymatic browning: phenotypic, biochemical and molecular characterization of native potatoes from Argentina. *Rev. Latinoam. la Papa* 15, 66–71. [2] Arias-Gaviria, D., Mejía-Doria, C. M., Ramos-Rengifo, L. & Morocho, H. C. (2012). Molecular characterization of the polyphenol oxidase gene in lulo (*Solanum quitoense* Lam.) var. Castilla. *Brazilian J. Plant Physiol.* 24, 261–272.

P8. Adsorción de metales pesados “Cr, Pb, Ni, Cd” por medio de subproductos del aguacate para la purificación de agua

Andrés Moreno Arredondo, Milton Gómez Barrera, Universidad del Quindío.

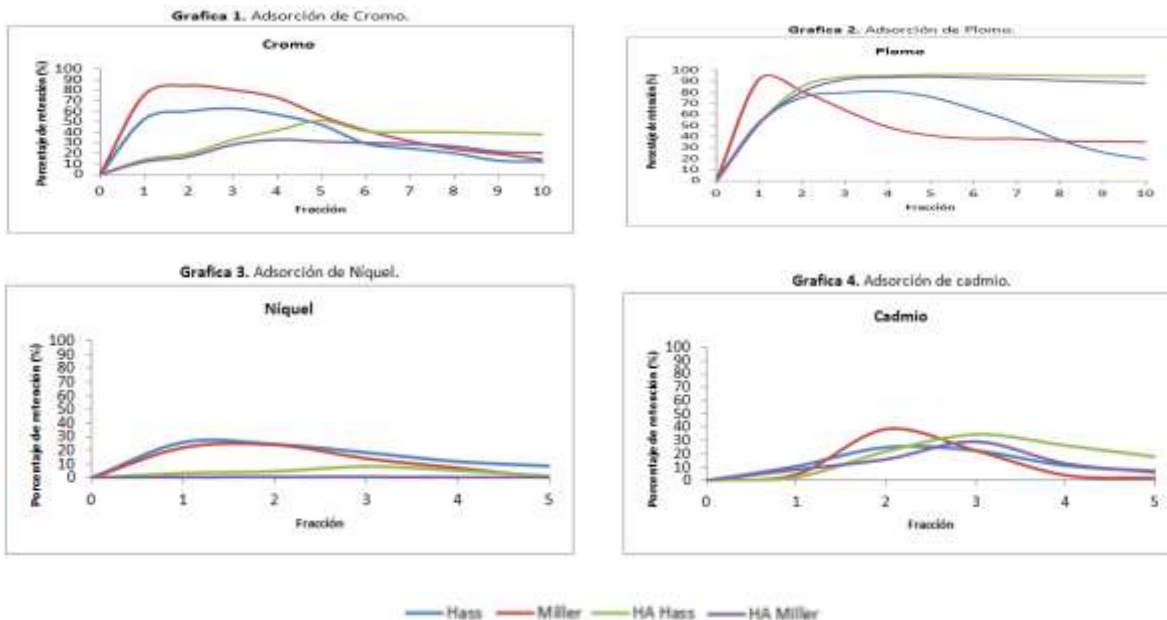
Resumen ejecutivo: Es necesario estudiar como eliminar los metales de las aguas debido a que algunos de estos metales son carcinogénicos o tóxicos, por lo cual se buscan soluciones que no tengan un impacto negativo para el medio ambiente.

Es por esto que el presente trabajo busca darle un uso a uno de los subproductos del aguacate, como lo es la semilla, analizando la capacidad de adsorción que presente frente a 4 metales diferentes (Cr, Pb, Ni, Cd).

Resumen:La contaminación con metales pesados es una problemática ambiental debido a que los metales son de alta peligrosidad ya que no pueden ser degradados (ni química, ni biológicamente), por este motivo se plantea emplear la semilla del aguacate (un subproducto de poco interés comercial) como un material con un potencial para la retención de metales pesados.

Palabras clave: Matriz vegetal, subproductos, adsorción, contaminación.

Introducción: La Persea Americana, o el aguacate, es una fruta que se cultiva en climas tropicales y mediterráneos, cada vez es más cultivada debido al interés global y el aumento en su consumo debido a la mejora en las técnicas de conservación y a la sensibilización de los consumidores frente a los beneficios del consumo para la salud, por lo cual existe un aumento en los subproductos del aguacate [1]. Todo el cuerpo de frutas exóticas tropicales es rico en compuestos bioactivos, como constituyentes fenólicos, carotenoides, vitaminas, fibra dietética, entre muchos otros [3]. Sin embargo, en el procesamiento de las frutas se descarta el gran porcentaje de subproductos, tales como cáscaras, semillas y carne sin usar, los cuales son generados en los diferentes pasos de las cadenas de procesamiento, de igual manera cabe resaltar que estos pueden ser benéficos frente a la adsorción de metales pesados [2,3]. En la mayoría de los casos, los subproductos desperdiciados pueden presentar contenidos similares o incluso mayores de compuestos bioactivos que el mismo producto, por lo cual en la actualidad se han empezado a estudiar las semillas de algunas frutas con el fin de conocer sus composiciones y a futuro poder darles un uso. La contaminación con metales es una problemática a trabajar, pues estos son de alta peligrosidad debido a que no pueden ser degradados (ni química, ni biológicamente), y además, tienden a bioacumularse y a biomagnificarse (lo que significa que se acumulan en los organismos vivos alcanzando concentraciones mayores que la que alcanzan en los alimentos o medioambiente, y que estas concentraciones aumentan a medida que ascendemos en la cadena trófica), provocando efectos tóxicos de muy diverso carácter [4,5].



Resultados:

- El material presentó retención frente a los 4 metales analizados, variando en todos los casos, pero se encontró que el material vegetal sin ningún tipo de tratamiento adsorbe eficientemente el cromo, mientras que las hidrólisis ácidas retienen eficientemente el plomo; además se evidencia que adsorben el níquel y el cadmio pero no son tan eficientes.
- El material se satura más rápido a la hora de adsorber níquel y cadmio en comparación con el cromo y el plomo.
- Las matrices presentan una excelente adsorción de plomo (más o menos 95%), siendo el metal que más retiene.
- Las matrices presentan adsorción pero no muy eficiente de níquel (más o menos 30%), siendo el metal que menos retiene.
- Las semillas son un método eficaz a la hora de retener este tipo de metales pesados.
- Las hidrólisis básicas no son recomendadas para retener estos tipos de metales, además, no se recomienda emplear un fraccionamiento en columna ya que el material no permite el paso de la solución.

Referencias: [1] Ayala-Zavala, J. F., Vega-Vega, V., Rosas-Domínguez, C., Palafox-Carlos, H., Villa-Rodríguez, J. A., Siddiqui, M. W., et al. (2011). Agro-industrial potential of exotic fruit byproducts as a source of food additives. *Food Research International*, 44, 1866-1874. [2] Bicas, J., Molina, G., Dionisio, A., Cavalcante Barros, F., Wagner, R., Marostica, M., Jr, & Pastore, G. (2011). Volatile constituents of exotic fruits from Brazil. *Food Research International*, 44(7), 1843-1855 (this issue). [3] Peschel, W., Sánchez-Rabaneda, F., Diekmann, W., Plescher, A., Gartzia, I., Jiménez, D., et al. (2006). An industrial approach in the search of natural antioxidants from vegetable and fruit wastes. *Food Chemistry*, 97(1), 137-150 [4] Tomado de http://www.mapama.gob.es/es/calidad-y-evaluacion-ambiental/temas/atmosfera-y-calidad-del-aire/emisiones/prob-amb/metales_pesados.aspx

P9. Hidrogenación de un derivado pirazólico de imina utilizando un catalizador de paladio-Imina.

María Isabel Murillo Rodríguez, Fernando Cuenú Cabezas, Universidad del Quindío

Resumen ejecutivo: Se llevó a cabo la síntesis de una imina pirazólica (**1**) y su coordinación a paladio, dicho complejo se utilizó como catalizador en la hidrogenación de la imina (**1**).

Resumen: En este trabajo se reporta la síntesis y caracterización de la imina ((*E*)-*N*-(3-(*tert*-butil)-1-(3-nitrofenil)-1*H*-pirazol-5-il)-1-(4-((*E*)-estirill)fenil)metenammina (**1**) su coordinación a paladio (**2**) y la evaluación catalítica en la hidrogenación de (*E*)-*N*-(3-(*tert*-butil)-1-(3-nitrofenil)-1*H*-pirazol-5-il)-1-(4-((*E*)-estirill)fenil)metenammina (**1**). La hidrogenación se llevó a cabo en un reactor tipo Parr.

Palabras clave: Imina, paladio, hidrogenación.

Introducción: Las iminas y sus complejos metálicos han sido objeto de numerosas investigaciones, tanto experimentales como teóricas. Un ejemplo de la mayoría de las características importantes de bases de Schiff y/o sus complejos metálicos es su actividad catalítica [1-6]. El estudio de la reacción de hidrogenación de iminas implica tener en consideración varios aspectos. El enlace C=N es un donante de densidad electrónica muy fuerte, lo que inhibe la hidrogenación del C=N. Además, esta reacción es muy poco exotérmica en comparación con otras reacciones similares, como la hidrogenación de alquenos, además las aminas resultantes son buenos ligantes, lo que llevaría al envenenamiento del catalizador [7-9]. Considerando estos antecedentes, resulta interesante realizar un trabajo de investigación en esta área, diseñando catalizadores de Paladio (II) que contengan ligando pirazólicos, de manera que sean eficientes en la reducción catalítica de iminas mediante transferencia de hidrógeno.

Resultados: La frecuencia de vibración del enlace C=N de la imina se presenta a 1612 cm^{-1} , mientras que en el complejo a 1592 cm^{-1} , esto es consistente con un alargamiento del enlace debido a las transiciones de transferencia de carga desde los orbitales $d\pi$ del metal a los orbitales $p\pi^*$ de anillo pirazol, densidad de carga que se desplaza hasta el enlace C=N de la imina (**1**). El RMN del complejo paladio-imina corrobora lo observado en el IR, con un desplazamiento hacia campo alto de un hidrógeno aromático del compuesto (**1**). En la hidrogenación de la imina (**1**), en dos horas se hidrogena el grupo nitro formando el compuesto (**3**), después de cuatro horas de reacción se hidrogenó el doble enlace olefínico generando el compuesto (**4**) y finalmente después de 8 horas de reacción se hidrogenó el grupo C=N formando el compuesto (**5**) (**Figura 1**).

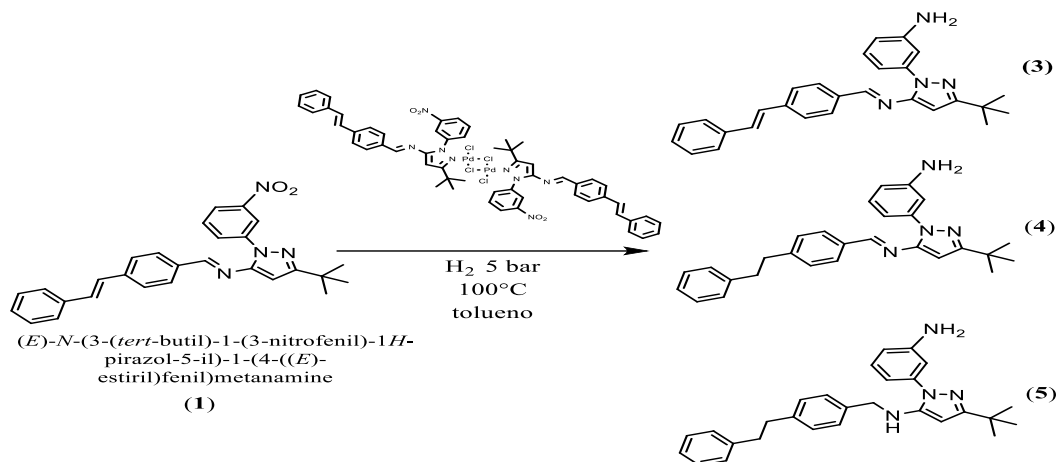


Figura 1. Hidrogenación catalítica del compuesto (1)

- Referencias:** [1]. K.C. Gupta, A.K. Sutar *Coord. Chem. Rev.*, 252 (2008), 1420–1450.
 [2]. J. Huang, B. Lian, Y. Qian, W. Zhou. *Macromolecules*, 35 (2002), 4871–4874.
 [3]. O.V. Nesterova, E.N. Chygorin, V.N. Kokozay, V.V. Bon, I.V. Omelchenko, O.V. Shishkin, J. Titis, R. Boca, A.J.L. Pombeiro, A. Ozarowski. *Dalton Trans*, 42 (2013), 16909–16919.
 [4]. N. Zhao, Q. Wang, G. Hou, H. Song, G. Zi. *Inorg. Chem. Commun*, 44 (2014), 86–90.
 [5]. A. Ghaffari, M. Behzad, M. Pooyan, H.A. Rudbari, G. Bruno. *J. Mol. Struct.*, 1063 (2014), 1–7.
 [6]. M. Amini, M. Khaksar, D.M. Boghaei, M. Bagherzadeh, A. Ellern, L.K. Woo. *J. Coord. Chem.*, 67 (2014), 2435–2444
 [7]. B.R. James, *Catal. Today*, 1997, 37, 209.
 [8]. H.U. Blaser, *Adv. Synt. Catal.*, 2002, 17, 344.
 [9]. K. Abdur-Rashid, W. Jia, X. Chen, R. Guo, C. Sui-Seng, D. Amoros, A.J. Loughb, *Dalton Trans.*, 2009, 8301 – 8307.

P10. Determinación *in vivo* de la inmunogenicidad del péptido lucilina proveniente de *Lucilia sericata* en ratones BALB/c

Andrés Gonzalo Restrepo Guerrero, Juan David Rivera Duran.

Resumen ejecutivo del trabajo: En este trabajo se planteó la siguiente pregunta de investigación: ¿cuál es el perfil inmunogénico del péptido Lucilina sobre ratones BALB/c, y cuáles son las posibles consecuencias sobre su actividad antimicrobiana *in vitro*?

Lucilina es un péptido antimicrobiano proveniente de las larvas de la mosca *Lucilia sericata*, del cual se ha reportado su actividad contra bacterias Gram negativas. Durante este trabajo, se encontró que el péptido fue inmunogénico al suministrarse a ratones BALB/c. Además, se evidenció que el péptido en presencia de suero tenía una mejoría en su actividad antimicrobiana, esto se debe muy probablemente a una actividad sinérgica entre el péptido y algún agente pre existente de la inmunidad de los ratones como péptidos o anticuerpos endógenos o el sistema del complemento. Sin embargo, se notó inhibición de la actividad antibacteriana del péptido por acción de los anticuerpos anti-Lucilina. Pese a que el péptido resulto inmunogénico, no deja de ser una buena alternativa terapéutica contra infecciones causadas por patógenos Gram negativos multirresistentes.

Resumen: Lucilina es un péptido antimicrobiano proveniente de las larvas de la mosca *Lucilia sericata*, del cual se ha reportado su actividad contra bacterias Gram negativas. En este trabajo de investigación se llevó a cabo la evaluación de la inmunogenicidad del péptido sintético Lucilina en un modelo de ratones BALB/c, igualmente, se evaluó como la respuesta inmune desencadenada afecto la actividad antimicrobiana del péptido sobre *E. coli* ATCC 35218; se encontró que el péptido no fue perjudicial para los ratones, pues se mantuvieron saludables durante los programas de inmunización; la respuesta inmune se midió, detecto y caracterizo por el método de ELISA, hallando que el péptido fue inmunogénico al suministrarse 0,05 mL de este a una concentración de 0,04 µg/mL por vía subcutánea, cada 2 días durante 3 semanas, igualmente, se determinó que la respuesta inmune fue variable dentro de los grupos, sin embargo se ignoran los motivos de este fenómeno. Por otra parte, usando el método de micro dilución en placa se encontró que la producción de anticuerpos anti-Lucilina afecto la actividad antimicrobiana *in vitro* del péptido, ya que se notó una disminución en su eficacia igual al 50%, pues al encontrarse en presencia de anticuerpos se requirió el doble de este para que hubiera inhibición del crecimiento bacteriano, al mismo tiempo, se encontró que el péptido al estar en presencia de suero tenía una mejoría en su actividad antimicrobiana, esto puede deberse a una actividad sinérgica entre el péptido y proteínas del sistema inmune innato, anticuerpos preexistentes o complemento. Por lo anterior, se puede concluir que pese a que el péptido resulto inmunogénico, no deja de ser una buena alternativa terapéutica contra infecciones causadas por patógenos Gram negativos multirresistentes, es por esto, deben llevarse a cabo otros estudios donde se investigue como disminuir su inmunogenicidad al mínimo, además de la evaluación de su seguridad *in vivo* para determinar su toxicidad y posibles futuras aplicaciones.

Palabras clave (máximo 5) : *In vivo*, Inmunogenicidad, BALB/c, *Lucilia sericata*, Lucina

Introducción: Los insectos al igual que el resto de los invertebrados, no son capaces de producir anticuerpos específicos. Aun así, pertenecen al grupo más exitoso en términos de

sobrevivencia y dominio de hábitats (Ratcliffe, 1985). Gran parte de este éxito se debe a sus mecanismos de defensa donde los péptidos antimicrobianos tienen un papel decisivo. La mosca verde, *Lucilia sericata* (Meigen, 1826) (Diptera: *Calliphoridae*) es una mosca cosmopolita con un alto grado de sinantropía, es decir, en estrecha relación con los asentamientos humanos. La acción de las larvas sobre las heridas está científicamente comprobada, a través de tres funciones primordiales: desbridamiento, actividad antimicrobiana y estimulación del tejido de granulación (Horobin et al. 2005; Parnés & Lagan, 2007). Diversas sustancias con efecto antimicrobiano han sido aisladas de las secreciones larvales, principalmente péptidos antimicrobianos (Cerovsky et al., 2010), (Cerovsky et al., 2011). Los péptidos antimicrobianos son, predominantemente, pequeños péptidos catiónicos que inhiben el crecimiento de los microbios y tienen una acción citotóxica directa sobre bacterias, hongos y virus. Modifican la respuesta inflamatoria local y activan mecanismos de reacción inmunitaria adaptativa (Castrillón, Palma, & Padilla, 2007). Estos péptidos antimicrobianos se han propuesto como una contramedida contra la resistencia a múltiples sustancias que es un problema de salud pública que se viene observando a nivel mundial después de la aparición de los antibióticos. El uso indiscriminado de los antibióticos y la presión selectiva ambiental realizada por antisépticos y desinfectantes ha generado una respuesta de supervivencia en los microorganismos, que los capacita para evadir con eficiencia la acción bactericida de algunos agentes (Cabrera et al., 2007). Lucilina es un péptido antimicrobiano tipo cecropina de 36 aminoácidos de carácter catiónico encontrado en las larvas de *Lucilia sericata*, y representa un posible candidato para la terapia contra bacterias Gram negativas multiresistentes (Télez & Castaño-Osorio, 2014). En la actualidad se conoce que todos los fármacos biológicos, son capaces de inducir una respuesta inmune por parte del huésped, conocida como inmunogenicidad. La presencia de anticuerpos antifármaco puede condicionar los niveles y la función del fármaco y, por lo tanto, el efecto terapéutico e incluso el perfil de seguridad en función de su mecanismo de acción (Carrascosa, 2013). Con este trabajo se pretende evaluar la inmunogenicidad de la proteína sintética lucilina con el fin de aclarar su panorama frente a su potencial y futuro uso farmacéutico.

Resultados:

1.1. **Obtención del péptido**

El péptido sintético corresponde a la siguiente secuencia de aminoácidos:

 10 20 30 40
GWLKKGKKI ERVQHQTRDA TIQTIGVAQQ AVNVAATLKG

Figura 1. Secuencia de aminoácidos del péptido GWLK-Lucilina. Tomado de (Télez & Castaño-Osorio, 2014)

Por otro lado, la proteína recombinante GWLK-Lucilina-CPD-His8 posee la siguiente secuencia de aminoácidos:


```

      10      20      30      40      50      60
GWLKKGKKI ERVGQHTRDA TIQTIGVAQQ AVNVAATLKG LADGKILHNQ NVNSWGPITV

      70      80      90      100     110     120
TPTTDGGETR FDGQIIVQME NDPVAKAAA NLAGKHAESS VVQLDSDGN YRVVYGDPSK

      130     140     150     160     170     180
LDGKLRWQLV GHGRDHSETN NTRLSGYSAD ELAVKLAKFQ QSFNQAENIN NKPDHISIVG

      190     200     210     220     230     240
CSLVSDOKQK GFGHQFINAM DANGLRVDVS VRSELAVDE AGRKHTKDAN GDMVQKAENN

      250
KVSLSWDAQG HHHHHHHH

```

Figura 2. Secuencia de aminoácidos de la proteína recombinante GWLK-Lucilina-CPD-His8. Tomado de (Téllez & Castaño-Osorio, 2014)

Los primeros cuatro aminoácidos, es decir GWLK, fueron añadidos tanto al péptido sintético como al recombinante, estos tienen la finalidad de aumentar el momento hidrofóbico y la carga neta del péptido, mientras que la etiqueta CPD busca mejorar la expresión, integridad y solubilidad de proteínas en *E. coli*; la etiqueta de poli-histidinas hace posible la detección del péptido por medio de anticuerpos monoclonales anti-histidinas (Téllez & Castaño-Osorio, 2014).

1.2. Programas de inmunización

A medida que estos se llevaron a cabo, se tomó un registro con los pesos de cada uno de los ratones, los registros de los pesos se muestran en forma de gráficas en los anexos 1, 2 y 3; el peso, es uno de los indicadores de la salud de un individuo, en las gráficas se puede notar la tendencia seguida por estos, y como se mantuvieron en aumento, por lo cual puede asumirse que en general los animales se mantuvieron con buen estado de salud y el tratamiento con el péptido no fue perjudicial.

1.3. Pruebas inmunoenzimáticas

1.3.1. Detección de anticuerpos posterior al primer programa de inmunización.

Los resultados hallados se encuentran relacionados en el gráfico 1, en este se observa que la respuesta inmune presentada por los ratones no fue homogénea; se detectó que los ratones 1 y 2, correspondientes al grupo 1, mostraron respuesta inmune, mientras que la respuesta exhibida por los otros dos individuos (3 y 4) tratados del mismo modo fue baja con respecto a los dos primeros.

Por otra parte, la respuesta inmune manifestada por los ratones del grupo 2, fue al igual que en el otro grupo, heterogénea, ya que la absorbancia obtenida al conjugar el suero del ratón 5 fue de más del doble que la alcanzada con el suero de ratón 6.

Por otro lado, la respuesta inmune no solo es detectable, sino también medible, y es directamente proporcional a la absorbancia encontrada al medir la placa a 405 nm, siendo este el máximo de absorción del producto formado al reaccionar la enzima fosfatasa alcalina con el sustrato pNPP; así pues, los individuos que mostraron una mayor respuesta inmune corresponden a los ratones 1 y 5 con absorbancias de 2,508 y 2,725 respectivamente, los individuos 2 y 6, tuvieron una respuesta inmune media con respecto a los demás y esta fue de 1,147 y 0,835 de absorbancia respectivamente; por último los ratones 3 y 4, mostraron

una respuesta inmune baja y corresponde a valores de absorbancia de 0,048 y 0,245 respectivamente; todas estas medidas corresponden a la primera dilución del suero, es decir, las medidas de absorbancia obtenidas al conjugar el suero diluido a una concentración final de 1:100.

Es importante recordar que los individuos 1, 2, 3, y 4 corresponden a los inoculados con el péptido diluido en solución salina, mientras que los individuos 5 y 6 fueron inoculados con el péptido diluido en solución salina y mezclado con adyuvante de Freund.

Además, se puede notar como el límite de detección presentado por los sueros se obtiene cuando estos se encuentran diluidos entre 1:1600 y 1:3200 aproximadamente; por último, es importante mencionar que la detección por parte del ELISA indirecto es selectiva para anticuerpos producidos en ratón del tipo inmunoglobulina G, de este modo los anticuerpos producidos son caracterizados como IgG de ratón.

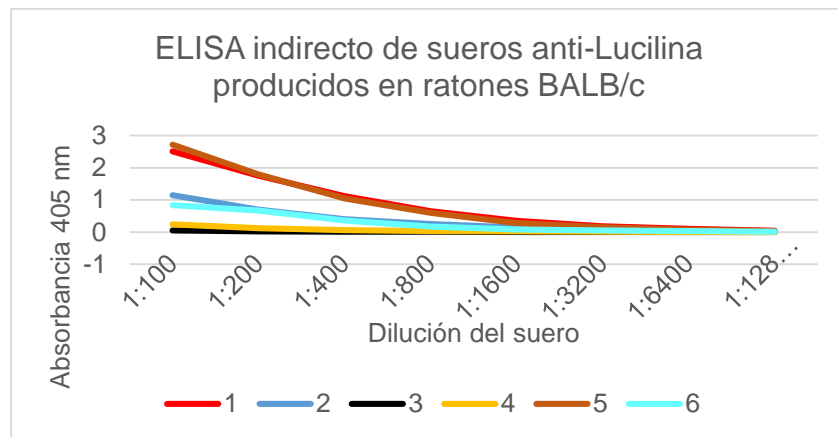


Gráfico 1. Elisa indirecto de sueros anti-Lucilina producidos en el primer programa de inmunización.

Como se puede ver en el gráfico 2, todos los valores de absorbancia correspondientes a los sueros diluidos a una concentración de 1:100 superan el valor del cut-off, por lo tanto se puede decir que el péptido al ser suministrado tanto en solución salina, así como mezclado con adyuvante de Freund, resulta inmunogénico, sin embargo la inmunogenicidad desencadenada no es homogénea, pero se ignoran los motivos por los cuales esto sucede, ya que los ratones fueron mantenidos bajo las mismas condiciones, macro y micro ambientales, con un periodo de luz/oscuridad de 12 h, agua y alimentación *ad libitum*, además de que se mantuvieron las mismas condiciones de inoculación por grupo y siempre se realizaron por personal competente, por otra parte, se debe tener en cuenta que los ratones BALB/c son una cepa de ratones endogámicos, por lo cual tienen muy baja variabilidad genética (Hanqing Xie, 2012).

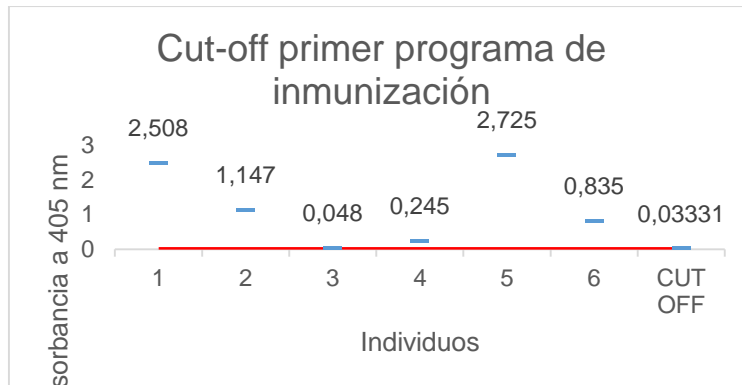


Gráfico 2. Comparación de la respuesta inmune con el punto de corte “cut-off” del ELISA correspondiente al primer programa de inmunización.

En el gráfico 3, se observan los resultados obtenidos en el ELISA, que muestran el grado de reconocimiento por parte de los sueros frente al péptido sintético y la proteína recombinante. El grado de reconocimiento se estima al comparar las absorbancias obtenidas con los sueros de los diferentes individuos diluidos a una concentración de 1:100 conjugados al péptido sintético y la proteína recombinante, previamente ligados a la placa de micro titulación a una concentración de 0,02 $\mu\text{g}/\mu\text{L}$; también se evaluó la capacidad de los sueros pre inmune para reconocer el péptido sintético.

Se puede observar, como los sueros pre inmune no tienen ningún reconocimiento por el péptido sintético, lo cual da certeza de que antes de comenzar el programa de inmunización los ratones no tenían anticuerpos anti-Lucilina (AAL), por otro lado, el reconocimiento de la proteína recombinante por parte de los sueros de todos los individuos es bajo, ya que las absorbancias obtenidas al conjugar los sueros con esta no superan las 0,3 unidades, mientras que el grado de reconocimiento por el péptido sintético es alto en ciertos individuos y lo presentaron los ratones con las respuestas inmunes más elevadas (1 y 5) con valores de absorbancia superiores a 2,5.

Así que, al comparar el grado de reconocimiento, se puede notar como las absorbancias obtenidas al conjugar los sueros de los individuos 1,2, 5 y 6 con el péptido sintético y la proteína recombinante tienen valores muy diferentes. El individuo 4 tuvo una respuesta inmune relativamente baja, pero reconociendo por igual el péptido sintético y la proteína recombinante, con valores de absorbancia iguales a 0.245 y 0.222 respectivamente; por otro lado, el individuo 3 mostro un mejor reconocimiento por la proteína recombinante, que por el péptido sintético.

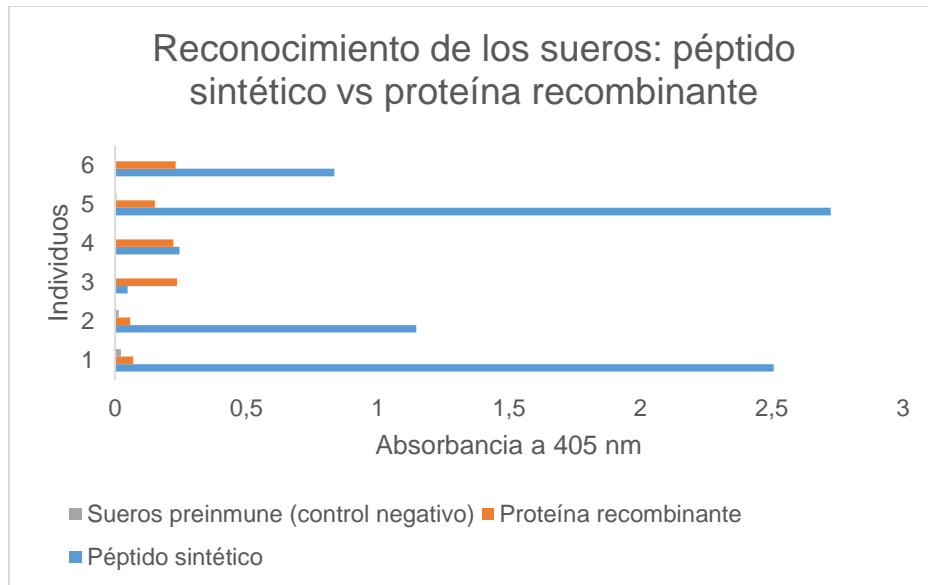


Gráfico 3. Comparación entre el grado de reconocimiento por parte de los sueros frente al péptido Lucilina sintético y recombinante.

El bajo reconocimiento de los sueros por la proteína recombinante, puede deberse, a que a pesar de ser el “mismo” péptido no comparten la misma estructura, ya que este último es expresado como una proteína de fusión con un dominio de la proteasa cisteína (CPD), y posee una etiqueta de poli-histidinas, (Téllez & Castaño-Osorio, 2014) tratándose en realidad de una proteína con mayor tamaño, la proteína GWLK-Lucilina-CPD-His8 no es fácilmente identificada por los anticuerpos anti-Lucilina (AAL) porque estos reconocen específicamente la estructura formada por los 40 aminoácidos correspondientes a la secuencia que compone al péptido sintético, o al menos, una región de este, es por esto que quizá, el gran tamaño de la etiqueta CPD (210 aminoácidos) dificulta el reconocimiento del recombinante. El péptido GWLK-Lucilina se muestra en la figura 1.



Figura 1. Péptido GWLK-Lucilina. Disponible en (<http://raptorx.uchicago.edu>)

Cabe destacar que al tratarse de anticuerpos policlonales, es decir, anticuerpos producidos por diferentes clones de células B, identifican diferentes sitios de unión del péptido y es por esta razón que hay poco reconocimiento, pero lo hay, por los aminoácidos que tienen en común ambas proteínas. La estructura de la proteína recombinante GWLK-Lucilina-CPD-His8 se muestra en la figura 2.

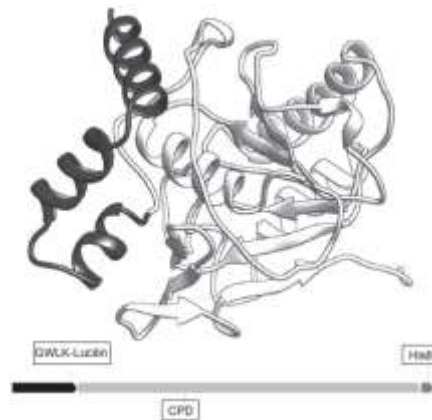


Figura 2. Proteína GWLK-Lucilina-CPD-His8. Tomado de (Téllez & Castaño-Osorio, 2014).

1.3.2. Detección de anticuerpos posterior al segundo programa de inmunización.

En los gráficos 4 y 6, se muestra la respuesta inmune presentada por los ratones inoculados en el segundo programa de inmunización y corresponden a los grupos 1 y 2 respectivamente. Se hicieron únicamente 6 diluciones del péptido, es decir, hasta una concentración final de 1:3200, debido a que se conocía del ELISA anterior que este era aproximadamente el límite de detección de los anticuerpos. Se evidenció, el mismo comportamiento encontrado en el ELISA posterior al primer programa de inmunización, viéndose como la respuesta inmune se mantiene variable dentro de un mismo grupo experimental, ya que la respuesta de algunos individuos es mayor a la de otros por varias unidades de absorbancia; como ya se mencionó, se ignoran las razones por las que se da dicha variabilidad.

En la gráfica 4, se observa la respuesta inmune presentada por los diferentes individuos del grupo 1, es decir, los ratones que fueron inoculados con el péptido sintético Lucilina diluido en solución salina a una concentración de 0,04 $\mu\text{g}/\mu\text{L}$. Cabe resaltar que el individuo 3, obtuvo la mayor respuesta inmune con un valor de absorbancia de 3,479 seguido por los individuos 1 y 6 con absorbancias de 2,787 y 2,468 respectivamente; los ratones con la menor respuesta inmune fueron los individuos 5, 2 y 4 con valores de absorbancia de 0,743; 0,125 y 0,056 respectivamente, todas estas medidas corresponden a la primera dilución del suero, es decir, una concentración final de 1:100.

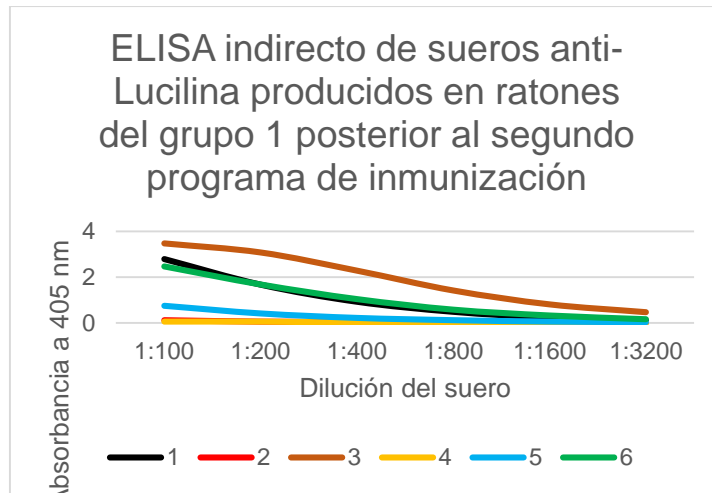


Gráfico 4. ELISA indirecto de sueros anti-Lucifina producidos en ratones del grupo 1 posterior al segundo programa de inmunización.

Pese a que de nuevo se presentó variabilidad en la respuesta inmune, la importancia del experimento radica en detectar si el péptido resulta inmunogénico o no, lo cual se logra mediante la comparación de la respuesta inmune obtenida, con el valor del punto de corte “cut-off”, como se puede apreciar en el gráfico 5.

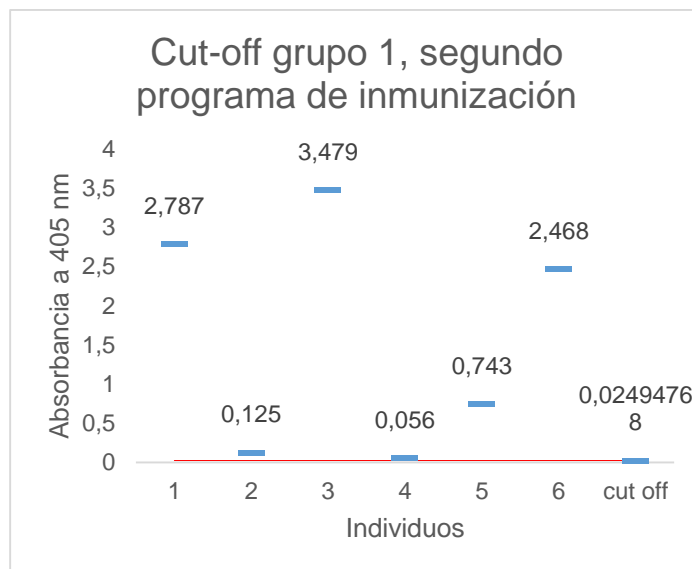


Gráfico 5. Comparación de la respuesta inmune del grupo 1 con el punto de corte “cut-off” del ELISA posterior al segundo programa de inmunización.

En la gráfica anterior, se puede notar como todos los valores de absorbancia obtenidos al conjugar los sueros de los ratones del grupo 1, superan el valor del “cut-off”, pues este fue igual a 0.025, mientras que la medición más baja corresponde a la del individuo 4 con 0.056 unidades de absorbancia, es por esto que nuevamente se puede decir que el péptido

Lucilina suministrado en solución salina a 0,04 µg/µL por vía subcutánea resulta inmunogénico, ya que se pudieron detectar anticuerpos anti-Lucilina (AAL).

La inmunogenicidad de los productos biológicos está influenciada por numerosos factores relacionados no sólo con el fármaco utilizado, sino también con el paciente y las características individuales, así como el programa de dosificación y la vía de administración; muchos de estos factores aún no están bien comprendidos (Carrascosa, 2013).

Lógicamente, la estructura molecular del fármaco es muy importante, y esto se determina por su diseño y la forma en que la molécula es sintetizada. La inmunogenicidad variará dependiendo de si el agente biológico es una proteína de fusión o un anticuerpo quimérico, humanizado o totalmente humano (Carrascosa, 2013); en el caso de ratones de laboratorio, que tan similar es el fármaco suministrado a las proteínas o péptidos endógenos del ratón.

La vía de administración también juega un papel importante, pues la administración subcutánea es también más inmunogénica que la administración oral o la infusión intravenosa, ya que permite el contacto prolongado entre la molécula y las células dendríticas (Carrascosa, 2013).

El resultado final en la lucha entre la molécula biológica y su consecución del efecto terapéutico deseado y los esfuerzos del sistema inmune para eliminarlo dependerá no sólo de si el sistema inmune del paciente puede desarrollar una respuesta eficaz al intruso, sino también de si la molécula del fármaco puede evadir los sistemas diseñados para eliminarla, un factor que será influenciado por su diseño (Carrascosa, 2013).

Por otra parte, en la gráfica 6, se puede ver la respuesta inmune presentada por los diferentes individuos del grupo 2, es decir, los ratones inoculados con el péptido diluido a una concentración final de 0,04 µg/µL en solución salina y adyuvante de Freund al 50% v/v.

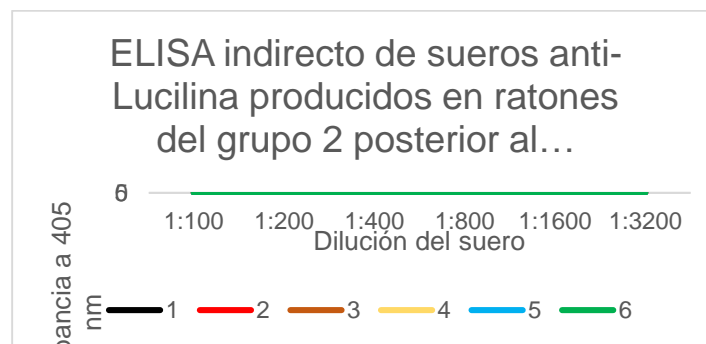


Gráfico 6. ELISA indirecto de sueros anti-Lucilina producidos en ratones del grupo 2 posterior al segundo programa de inmunización.

En el gráfico anterior, se muestran los resultados obtenidos con el espectrofotómetro, se puede ver que los individuos que produjeron la mayor respuesta inmune en el grupo 2 corresponden a los ratones 3 y 5 con absorbancias iguales a 3,552 y 3,538 respectivamente, seguidos en orden decreciente de absorbancia por los individuos 2, 1, 6 y 4, con valores iguales a 1,361; 0,763; 0,695 y 0,526 respectivamente, dichas medidas fueron obtenidas con los sueros conjugados a una concentración final de 1:100.

Es importante mencionar, que al igual que en casos anteriores la respuesta inmune fue variable entre los individuos del grupo 2, sin embargo, se nota como todos presentaron una respuesta inmune por encima de las 0,5 unidades de absorbancia en la primera dilución del suero, esta respuesta inmune es comparada con el punto de corte “cut-off” en la gráfica 7.

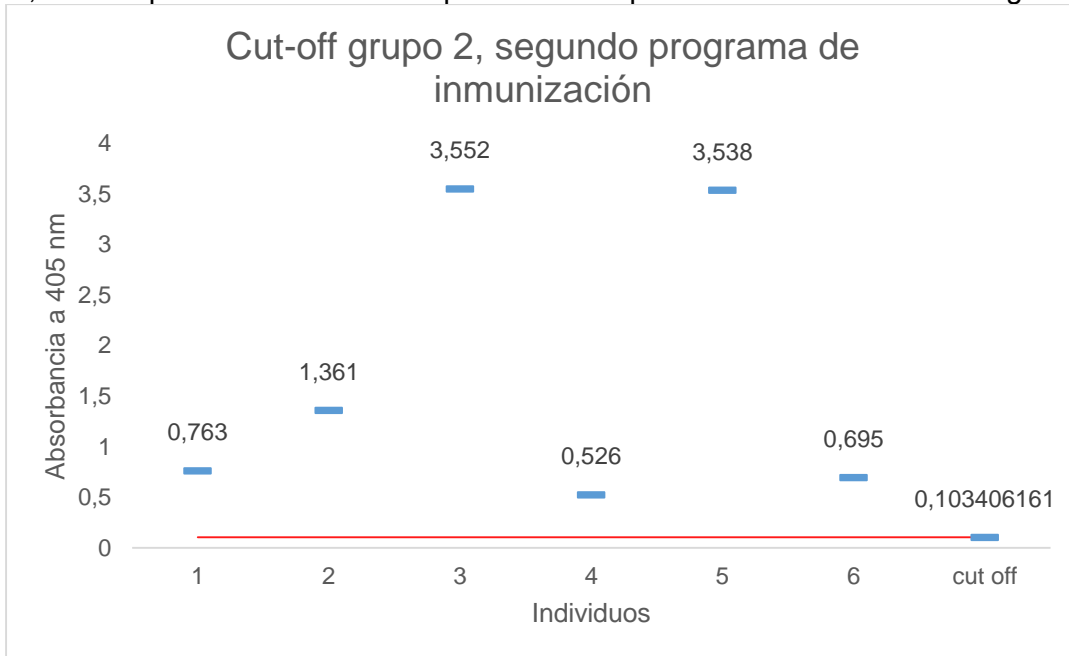


Gráfico 7. Comparación de la respuesta inmune del grupo 2 con el punto de corte “cut-off” del ELISA posterior al segundo programa de inmunización.

En la gráfica 7, se puede notar como todos los valores de absorbancia obtenidos al conjugar los sueros de los ratones del grupo 2, superan el valor del “cut-off”, ya que se encontró que este fue de 0.103, mientras que la medición más baja corresponde a la del individuo 4 con 0.526 unidades de absorbancia, es por esto que, el péptido Lucilina al ser proporcionado a los ratones por vía subcutánea a una concentración final de 0,04 $\mu\text{g}/\mu\text{L}$ en solución salina y adyuvante de Freund al 50% v/v es inmunogénico, tal y como se esperaba pues el adyuvante de Freund es una sustancia inmunomoduladora que se encarga de la potenciación de la respuesta inmune de los animales de laboratorio durante la inmunización experimental con vistas a la producción de antisueros; los adyuvantes son sustancias o preparados químicos que, incorporados al antígeno o inyectados simultáneamente con él, hacen más efectiva la respuesta inmune. Con su empleo se logra una economía de antígeno y de tiempo, así como un mayor nivel de anticuerpos específicos (Humberto et al., 1999).

1.3.3. *Análisis de varianza*

Para verificar la inmunogenicidad del péptido, se llevaron a cabo dos análisis de varianza (ANOVA) de un solo factor, donde las diferencias se consideraron estadísticamente significativas cuando el valor de $p < 0.05$. Los análisis fueron realizados únicamente con los

datos del ELISA posterior al segundo programa de inmunización, pues eran los únicos en cantidad suficiente para hacer el análisis.

En el primer análisis de varianza, se compararon las absorbancias obtenidas con los sueros pre inmune y los sueros inmune del grupo 1, es decir, los ratones inoculados con el péptido diluido en solución salina.

Según el análisis de varianza hay diferencias significativas, ya que el valor p es 0,0249; estas diferencias se deben a la presencia de anticuerpos anti-Lucilina, por lo cual se verifica su existencia. Los resultados se muestran en el grafico 8, por medio de un gráfico de medias y prueba de rangos múltiples LSD de Fisher, donde se observa que el intervalo para el suero inmune (1) no se traslapa con el intervalo del suero pre inmune (2); indicando una diferencia estadísticamente significativa entre las medias con un nivel de significancia igual al 95%.

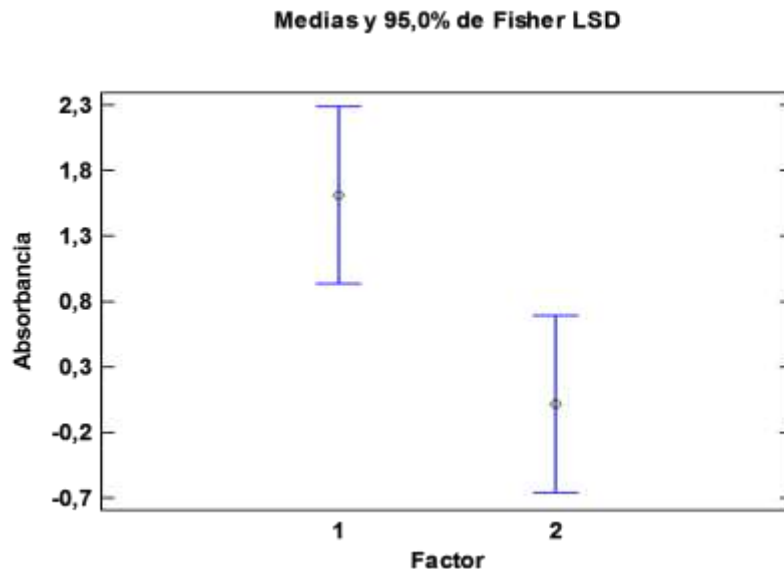


Gráfico 8 Gráfico de medias y prueba de rangos múltiples LSD de Fisher del primer ANOVA.

En el segundo análisis de varianza, se compararon las absorbancias obtenidas con los sueros inmune del grupo 1 y 2, es decir, de los ratones inoculados con el péptido diluido en solución salina únicamente, y los ratones inoculados con el péptido mezclado con adyuvante.

Según el análisis de varianza, no hay diferencias estadísticamente significativas, ya que el valor p es 0,8805; la razón por la cual no hay diferencias significativas se debe a que en ambos sueros hay presencia de anticuerpos anti-Lucilina, por lo cual se verifica su existencia en los sueros del grupo 1. Los resultados se muestran en el grafico 9, por medio de un gráfico de medias y prueba de rangos múltiples LSD de Fisher, donde se observa que los intervalos se traslapan indicando que no hay una diferencia estadísticamente significativa entre las medias con un nivel de significancia igual al 95%.

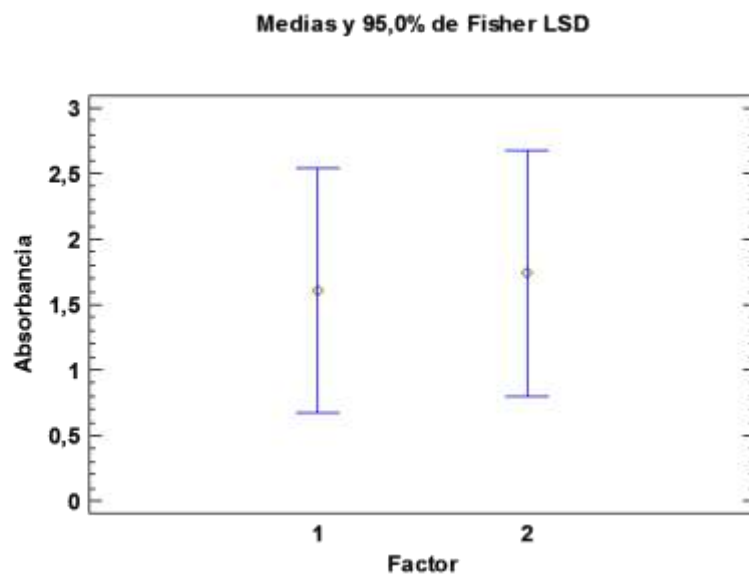


Gráfico 9. Gráfico de medias y prueba de rangos múltiples LSD de Fisher del segundo ANOVA.

1.4. Ensayos de actividad biológica

1.4.1. Micro dilución en placa de Lucilina frente a *E. coli* ATCC 35218.

Con el fin de conocer la concentración mínima inhibitoria (CMI) y el impacto de los sueros inmune con anticuerpos anti-Lucilina (AAL) sobre la actividad antimicrobiana del péptido, se aplicó el método de micro dilución en placa con indicador metabólico de resazurin contra *E. coli* ATCC 35218 en placas de polipropileno de 96 pozos; se evaluó la actividad antimicrobiana a concentraciones seriadas del péptido sintético 1:2 a partir de 50 µg/mL hasta 0,0976 µg/mL, por triplicado, con y sin suero inmune proveniente del individuo 5 del grupo 2 del segundo programa de inmunización; los resultados obtenidos se muestran en los gráficos 10 y 11, en los que se puede apreciar cual es la concentración de péptido Lucilina a la cual el crecimiento de las bacterias inoculadas se ve inhibido (CMI).

En el gráfico 10, se puede apreciar la CMI del péptido Lucilina; se observa que la concentración a la que tiene actividad inhibitoria es de 12,5 µg/mL.

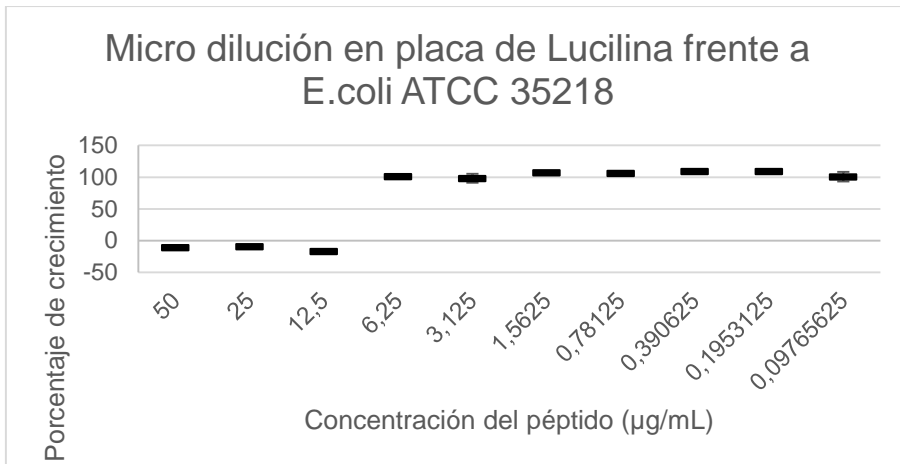


Gráfico 10. Micro dilución en placa del péptido Lucilina contra *E.coli* ATCC 35218. Por otra parte, en el gráfico 11, se puede observar como la CMI del péptido Lucilina en presencia de suero inmune, es de 3,125 µg/mL.

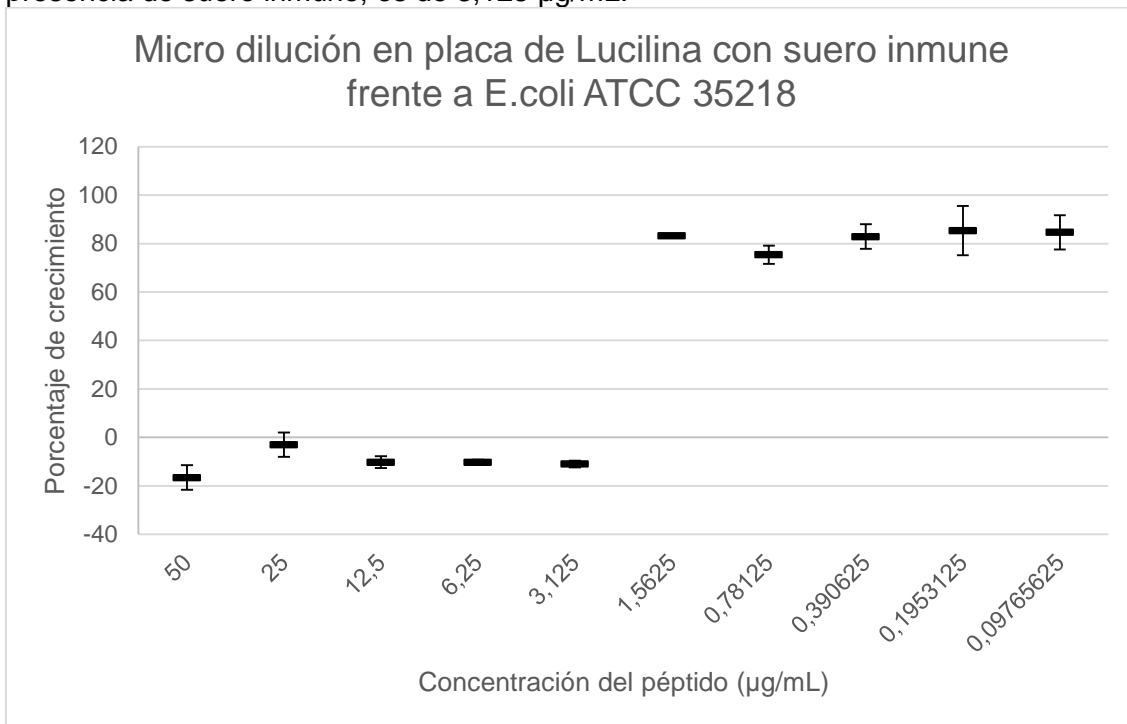


Gráfico 11. Micro dilución en placa del péptido Lucilina con suero inmune contra *E.coli* ATCC 35218.

Al comparar de qué manera influye la presencia del suero inmune sobre la actividad antimicrobiana del péptido contra *E. coli* ATCC 35218, se pudo evidenciar que, la presencia del suero ocasiona una mejoría en la CMI, ya que en presencia de este se requieren 4 veces menos cantidad del péptido para ocasionar inhibición del crecimiento bacteriano. Este fenómeno puede explicarse debido a que en el suero de los ratones pueden encontrarse otros agentes antimicrobianos propios de la inmunidad de los ratones. El

sistema innato de defensa contiene numerosos péptidos secretados y proteínas con actividad antimicrobiana que incluyen lisozima, lactoferrina, inhibidor de la proteasa leucocitaria secretora, fosfolipasa A2 secretora, defensinas, catelicidas, proteasas, anticuerpos preexistentes y complemento (Moser et al., 2002).

La actividad combinada del péptido Lucilina con agentes antimicrobianos propios de la inmunidad de los ratones presentes en su suero, son probablemente la razón por la cual se dio la mejoría en la actividad antimicrobiana del péptido sobre *E. coli* ATCC 35218, y esta mejoría se vio directamente reflejada en el valor de la CMI. Sin embargo, teniendo en cuenta la gran cantidad de proteínas que puede contener el suero, y al observarse una mejoría en la actividad antimicrobiana del péptido por la presencia de este, no se logró apreciar el efecto de los anticuerpos anti-Lucilina sobre el péptido, es por esto que se debe llevar a cabo la comparación de las CMIs del péptido en presencia de suero inmune y suero pre inmune, dado a que en lo único en que difieren ambos es la existencia de anticuerpos anti-Lucilina.

1.4.2. Micro dilución en placa de Lucilina con suero pre inmune e inmune frente a *E. coli* ATCC 35218.

Para apreciar el efecto de los anticuerpos anti-Lucilina sobre la actividad antimicrobiana del péptido, se llevó a cabo la comparación de las CMIs presentadas por este, tanto en presencia de suero inmune, como en presencia de suero pre inmune, ambos, a la misma concentración, diluidos 1:100; nuevamente, los sueros provenían del individuo 5 del grupo 2, del segundo programa de inmunización. La concentración inicial evaluada del péptido fue de 25 µg/mL ya que se conocía su CMI, siendo esta 12,5 µg/mL; la última concentración evaluada fue la sexta dilución de la concentración inicial, es decir, 0,78125 µg/mL, pues se sabía de antemano que la CMI del péptido en presencia de suero inmune fue de 3,125 µg/mL; por otro lado, pese a que la finalidad era comparar la incidencia de los sueros inmune y pre inmune sobre las CMIs, también, se evaluó la CMI del péptido, aunque no por triplicado, para verificar que el resultado encontrado previamente fuera reproducible, el resultado se muestra en el grafico 12, en este se puede observar como la CMI del péptido fue de nuevo igual a 12,5 µg/mL, verificándose la reproducibilidad del ensayo.

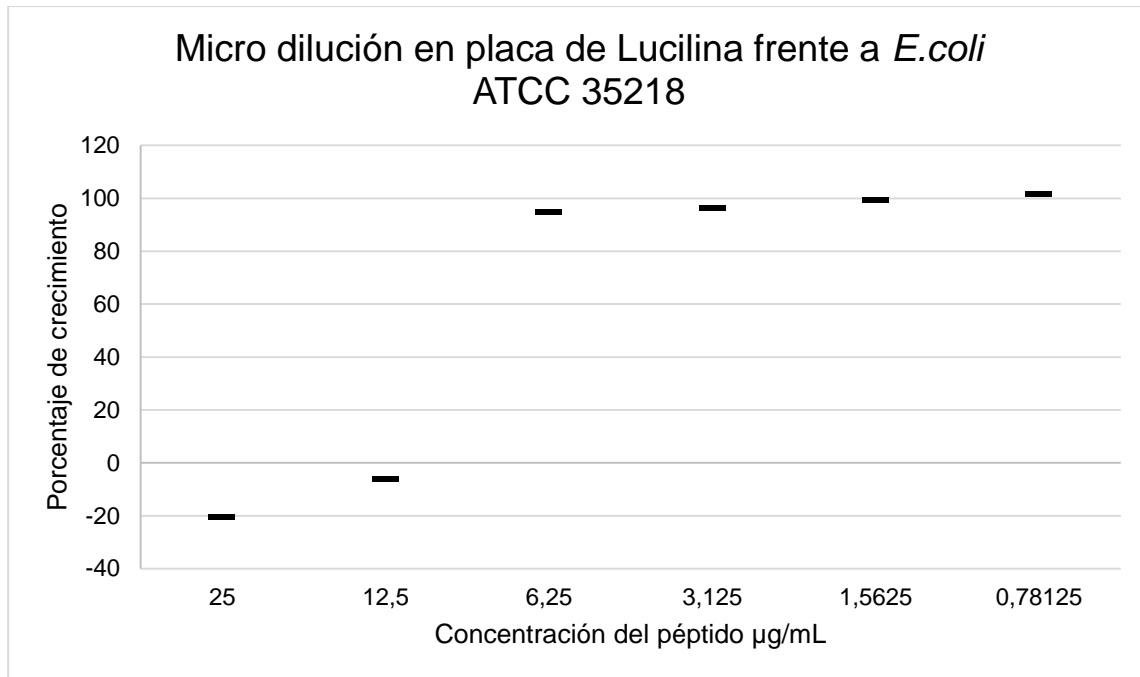


Gráfico 12. Micro dilución en placa de Lucilina frente a *E.coli* ATCC 35218.

Además, en el gráfico 13, se muestra el resultado obtenido al evaluar la CMI del péptido en presencia de suero inmune, de igual modo, el resultado fue reproducible y la CMI hallada fue de 3,125 µg/mL.

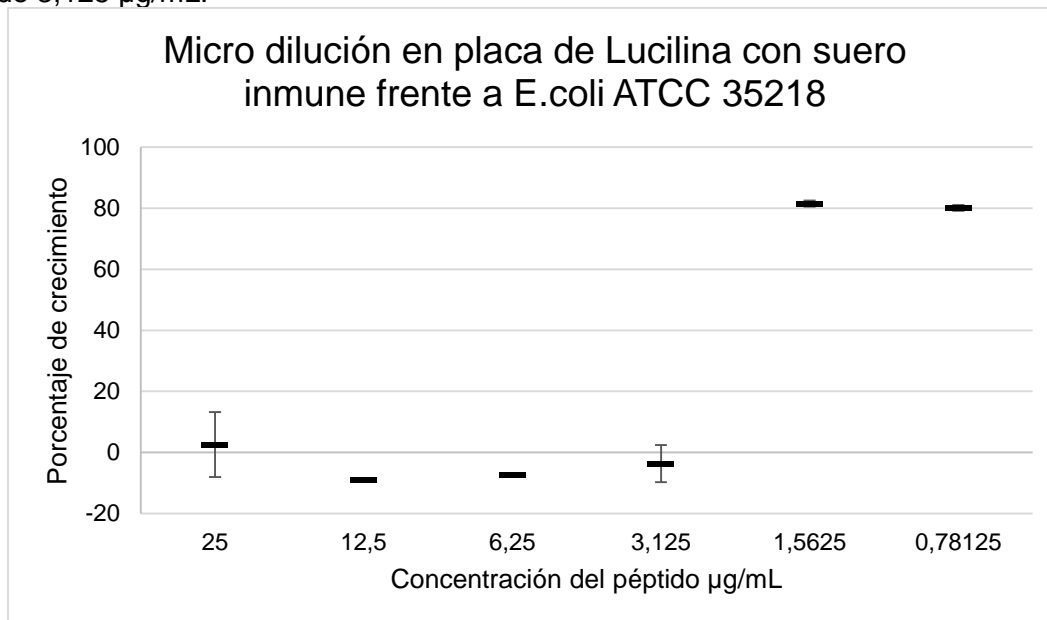


Gráfico 13. Micro dilución en placa de Lucilina con suero inmune frente a *E.coli* ATCC 35218.

Por otra parte, en el gráfico 14 se muestra el resultado encontrado al evaluar la CMI del péptido en presencia de suero pre inmune; se encontró que la CMI fue de 1,5625 µg/mL, es decir, una dilución por debajo de la encontrada con el péptido en presencia de anticuerpos anti-Lucilina (suero inmune), tal y como se puede observar en el gráfico 13. Al comparar las CMI del péptido en presencia de suero inmune (gráfico 13) y suero pre inmune (gráfico 14) se puede evidenciar como la presencia de anticuerpos ocasiona una desmejora en el valor de la CMI, pues en presencia de estos se necesita que el péptido se encuentre a una concentración de 3,125 µg/mL para que se lleve a cabo la actividad inhibitoria, esto corresponde al doble de péptido que necesita usarse cuando este se encuentra sin anticuerpos anti-Lucilina (suero pre inmune); por lo anterior, se puede decir que la tasa de neutralización *in vitro* por parte de los anticuerpos sobre el péptido es igual al 50%.

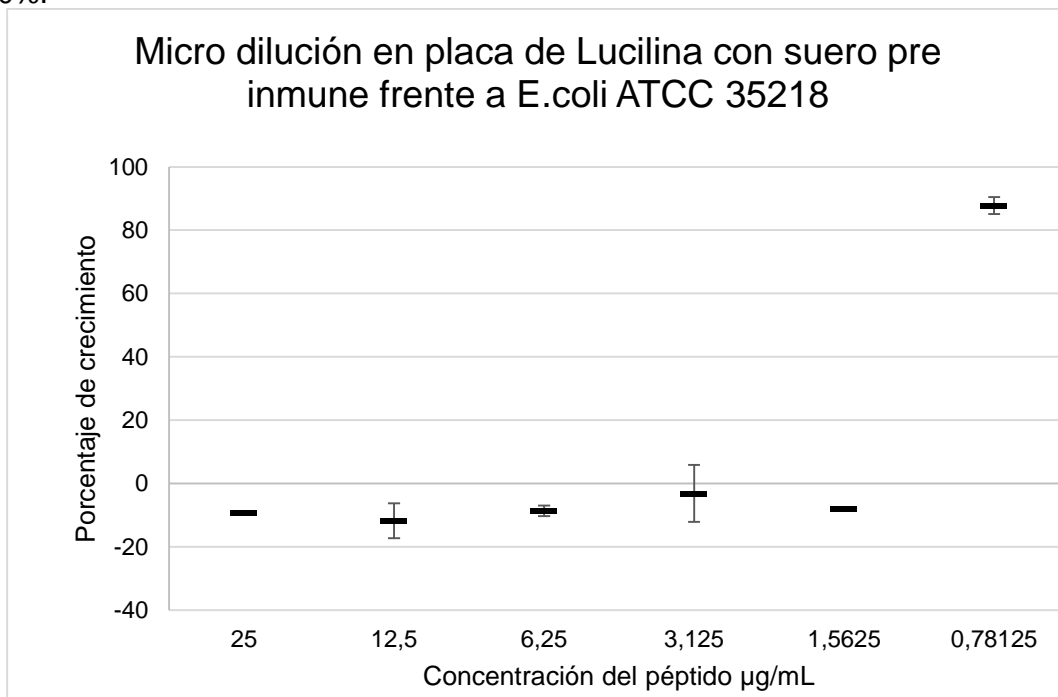


Gráfico 14. Micro dilución en placa de Lucilina con suero pre inmune frente a *E.coli* ATCC 35218

Las consecuencias clínicas de la formación de anticuerpos varían con el tipo de anticuerpo presente (Schellekens, 2002), si se trata de anticuerpos neutralizantes o no (Carrascosa, 2013).

Los anticuerpos neutralizantes se definen como aquellos que se unen al sitio activo de la proteína terapéutica y por lo tanto inhiben su función, neutralizándola. Como resultado, la eficacia puede verse disminuida y puede ocurrir la falla terapéutica (Brinks, Jiskoot, & Schellekens, 2011; Schellekens, 2002). Cuando se presentan a bajos títulos, la reducción en la exposición de los receptores blanco a la proteína terapéutica puede ser mínima y sin efectos clínicos aparentes. Ante títulos altos se observa una reducción en la respuesta al tratamiento (Schellekens, 2002).

La presencia de ADAs neutralizantes no excluye necesariamente un efecto terapéutico. La eficacia clínica dependerá del equilibrio entre las concentraciones de fármaco y los niveles de anticuerpos y si los niveles de fármaco resultantes son lo suficientemente altos para

conseguir el resultado clínico deseado. Si se consigue o no una respuesta satisfactoria, depende del mantenimiento de niveles de fármaco suficientemente elevados (Carrascosa, 2013).

Mientras que los anticuerpos no neutralizantes son aquellos que se unen a la proteína terapéutica pero que no afectan su actividad intrínseca, ni el sitio receptor, es decir que no la neutralizan. Aparentemente no tienen efectos biológicos, pero pueden formar inmunocomplejos que pueden cambiar la farmacocinética de la proteína administrada (ej. aceleran el aclaramiento plasmático del medicamento) y de esta manera afectan su eficacia terapéutica (Brinks et al., 2011; Schellekens, 2002). Aunque el efecto biológico de estos anticuerpos está menos establecido, no se puede afirmar que sea inexistente (Carrascosa, 2013).

El impacto de los anticuerpos anti-fármacos (ADAs) (en este caso, anticuerpos anti-Lucilina), sobre la eficacia puede estar relacionado con su capacidad para inhibir el efecto del fármaco o su papel en la aceleración de su eliminación. En cualquier caso, el resultado es el mismo: el efecto terapéutico del fármaco disminuye con un consecuente efecto negativo sobre el tratamiento. (Carrascosa, 2013)

Referencias:

- Brinks, V., Jiskoot, W., & Schellekens, H. (2011). Immunogenicity of therapeutic proteins: The use of animal models. *Pharmaceutical Research*, 28(10), 2379–2385. <https://doi.org/10.1007/s11095-011-0523-5>
- Carrascosa, & J M. (2013). Immunogenicity in Biologic Therapy: Implications for Dermatology. *Actas Dermosifiliogr*, 104(6), 471–479. <https://doi.org/10.1016/j.ad.2013.02.005>
- Castañeda-casimiro, J., Ortega-roque, J. A., Marcela, A., Aquino-andrade, A., Serafín-lópez, J., Estrada-parra, S., & Estrada, I. (2009). Péptidos antimicrobianos: péptidos con múltiples funciones. *Alergia, Asma E Inmunología*, 18, 16–29.
- Chirino, A. J., Ary, M. L., & Marshall, S. a. (2004). Minimizing the immunogenicity of protein therapeutics. *Drug Discovery Today*, 9(2), 82–90. [https://doi.org/10.1016/S1359-6446\(03\)02953-2](https://doi.org/10.1016/S1359-6446(03)02953-2)
- Giraldo, L. F. G., & Zuluaga, C. G. (2013). Bioética en la experimentación científica con animales: Cuestión de reglamentación o de actitud humana. *Revista Lasallista de Investigación*, 9(1), 159–166.
- Gutiérrez, P., & Orduz, S. (2003). Péptidos Antimicrobianos: Estructura, Función Y Aplicaciones Antimicrobial Peptides: Structure, Function and Applications. *Actual Biol*, 25(78), 5–15.
- Hanqing Xie. (2012). Ratones y ratas de laboratorio, 27.
- Humberto, L., Morris, J., Clara, L., Manrique, M., Roberto, L., & Díaz, T. A. (1999). ADYUVANTES INMUNOLÓGICOS. *Revista Cubana de Investigaciones Biomédicas*, 18(2), 130–137.
- Leenaars, M., & Hendriksen, C. F. M. (2005). General Introduction : Protocols for. *Ilar Journal*, 46(3), 269–279. <https://doi.org/10.1093/ilar.46.3.269>
- Lorian, V. (1996). Antibiotics in Laboratory Medicine. *Williams and Wilkins, Baltimore.*, (Fourth Edition), 52–111.
- Maldonado, N. A., Múnera, M. I., López, J. A., Sierra, P., Robledo, C. G., Robledo, J., & Germen, G. (2014). Tendencias de la resistencia a antibióticos en Medellín y municipios del Área Metropolitana entre 2007-2012: resultados de seis años de

- vigilancia. *Biomédica*, 34(3), 433–446. <https://doi.org/10.7705/biomedica.v34i3.1658>
- Moser, C., Weiner, D. J., Lysenko, E., Bals, R., Weiser, J. N., & Wilson, J. M. (2002). ??-Defensin 1 Contributes To Pulmonary Innate Immunity in Mice. *Infection and Immunity*, 70(6), 3068–3072. <https://doi.org/10.1128/IAI.70.6.3068-3072.2002>
- Mylonakis, E., Podsiadlowski, L., Muhammed, M., & Vilcinskas, A. (2016). Diversity, evolution and medical applications of insect antimicrobial peptides. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series B, Biological Sciences*, 371(1695), 169–184. <https://doi.org/10.1098/rstb.2015.0290>
- Pérez, H., & Robles, A. (2013). Aspectos básicos de los mecanismos de resistencia bacteriana. *Revista Médica*, 4(4), 186–191. Retrieved from <http://www.medigraphic.com/pdfs/revmed/md-2013/md133i.pdf>
- Pöppel, A. K., Vogel, H., Wiesner, J., & Vilcinskas, A. (2015). Antimicrobial peptides expressed in medicinal maggots of the blow fly *Lucilia sericata* show combinatorial activity against bacteria. *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*, 59(5), 2508–2514. <https://doi.org/10.1128/AAC.05180-14>
- Red Nacional de la Vigilancia de la resistencia Bacteriana y de las Infecciones Asociadas al Cuidado de la salud, & (Colombia). (2010). Estado Del Arte De La Resistencia Bacteriana Y La Vigilancia Epidemiológica De Las Infecciones Asociadas Al Cuidado

P11. Síntesis y caracterización del complejo paladio-pirazolimina. Evaluación catalítica en reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki-Heck en medio acuoso
Andrés C. Restrepo, Fernando Coenú, Universidad del Quindío

Resumen ejecutivo: Síntesis y caracterización del complejo paladio- (E)-2-(((3-(tert-butil)-1-(3-nitrofenil)-(pirazol-5il)imino)metil)fenol, C-C tipo Mizoroki-Heck en medio acuoso.

Resumen: En este trabajo de investigación se reporta la síntesis de la pirazol-imina (E)-2-(((3-(tert-butil)-1-(3-nitrofenil)-(pirazol-5il)imino)metil)fenol, obtenida por medio de una condensación entre salicilaldehído y 3-nitrofenilpirazol. El compuesto pirazo-limina se coordinó a paladio, obteniéndose un dímero de paladio cuadrado planar. Los compuestos sintetizados fueron caracterizados por IR, masas y RMN. El complejo es regioselectivo hacia la producción de estirilaldehído. Cuando se realizó la reacción de acoplamiento C-C entre p-bromobenzaldehído y estireno, empleando como solvente DMF o DMF/H₂O.

Introducción: Los ligandos coordinados a un centro metálico influyen en el rendimiento de los catalizadores homogéneos [1]. Recientemente, los compuestos N-heterocíclicos (NH) se han empleado como ligandos alternativos mejores que los ligandos fosfina. Los compuestos N-heterociclos son ligandos donores σ más fuertes que las fosfinas, ampliamente utilizadas y son fáciles de derivar; Por lo tanto, se pueden sintetizar complejos NH estables con diversas propiedades [2]. En particular, los complejos metal-NH muestran una mejor actividad catalítica en diversas transformaciones químicas tales como formaciones de enlaces C-C [3,4], metátesis de olefinas [5], hidrosililación [6], copolimerización de CO-etileno [7] y reacciones de hidrogenación [8]. Los complejos Pd-NH son la elección para ser considerados como catalizadores versátiles y robustos para las reacciones de formación de enlaces C-C; Las reacciones se pueden llevar a cabo en condiciones suaves y con baja concentración del catalizador [9]. A continuación, se informa de la síntesis, caracterización de un nuevo ligando coordinado a Pd así como de su evaluación en reacciones de acoplamiento C-C tipo Mizoroki Heck de p-bromobenzaldehído y Estireno.

Resultados: Caracterización del Ligando: El espectro de masas de la imina (E)-2-(((3-(tert-butil)-1-(2-nitrofenil)-1H-pirazol-5-yl)imino)metil)fenol, muestra que el ión molecular corresponde al pico base el cual tiene una masa de 364 m/z (100%). Otras masas observadas son: 349 m/z que consistente a la pérdida del metilo (M-15). El espectro IR muestra el estiramiento asimétrico C-H de los -CH₃ del tert-butilo a 2968 cm⁻¹ y estiramiento simétrico a 2863 cm⁻¹; a 3162 cm⁻¹ estiramiento H-C= del pirazol; a 3097 cm⁻¹ estiramiento C-H; el estiramiento del enlace -C=N de la imina se observa a 1604 cm⁻¹. El espectro RMN presenta 12 señales las cuales integran para un total de 20 protones correspondientes al número de hidrógenos del compuesto; dH (CDCl₃) 6.41 ppm (s.a, 1H) H-4; 1.44 ppm (s.a, 9H) H-7; 8.58 (s, 1H) H-9 ; 8.0 ppm (d, 1H) H-11 ; 7.69 ppm (t, 1H) H-12; 8.24 ppm (d, 1H) H-13; 8.8 ppm (s.a, 1H) H-14; 6.98 ppm (t, 2H) H-16; 7.02 ppm (m, 2H) H-17; 7.44 ppm (m, 2H) H-18, 7.42 ppm (t, 2H) H-19; 11.85 ppm (s.a, 1H) OH. Caracterización del complejo: El espectro IR presenta las frecuencias de vibración; estiramiento del OH a 3442 cm⁻¹, esta señal no se observó en el ligando, lo cual es consistente con el rompimiento del enlace de hidrógeno intramolecular debido a la pérdida de planaridad del ligante imina al coordinarse a Pd (II); el estiramiento -C=N es observado a 1606 cm⁻¹; los estiramientos asimétrico y simétrico del grupo nitro se observan a 1533 y

1349 cm⁻¹ respectivamente. RMN dH (DMSO-d₆) 6.74 ppm (s.a, 2H) H-4; 1.35 ppm (s.a, 18H) H-7; 8.6 (s, 2H) H-9; 8.2 (t, 4H) H-11; 6.99 ppm (m, 4H) H-12 ; 8.23 ppm (t, 4H) H-13 ; 9.16 ppm (s.a, 2H) H-14 ; 6.97 ppm (m, 4H) H-16; 7.81 ppm (m, 4H) H-17; 7.44ppm (t, 2H) H-18, 7.79 ppm (m, 2H) H-19 ; 11.29 ppm (s.a, 2H) OH.

Estireno- <i>p</i> -bromobenzaldehído 1:3000 K ₂ CO ₃ ; 140°C		
	DMF	DMF/H ₂ O
% Conversión	94	76
% Selec. Estilbeno	98	100
% Selec. Isomero	2	0.0
TOF (cm ⁻¹)	355	284
TON	2837	2273
Tiempo (h)	8	8

Tabla 1: Reacciones de acoplamiento C-C Mizoroki-Heck entre *p*-bromobenzaldehído y Estireno en DMF-H₂O.

La tabla 1, muestra que el catalizador presento una alta actividad en DMF llegando a un 100% de conversión a las 8 horas de reacción, y cuando la reacción se realiza en medio acuoso la conversión disminuye al 76%, pero el catalizador se vuelve regio selectivo hacia la producción del 4-estirilbenzaldehído.

Referencias: [1]: (a) A.R. Chianese, A. Kovacevic, B.M. Zeglis, J.W. Faller, R.H. Crabtree, *Organometallics* 23 (2004) 2461; (b) E. Mas-Marza, E. Peris, I. Castro-Rodriguez, K. Meyer, *Organometallics* 24 (2005) 3158; (c) W.A. Herrmann, V.P.W. Böhm, C.W.K. Gstöttmayr, M. Grosche, C.P. Reisinger, T. Weskamp, *J. Organomet. Chem.* 617 (2001) 616. [2]: (a) T. Weskamp, V.P.W. Böhm, W.A. Herrmann, *J. Organomet. Chem.* 600 (2000) 12; (b) D. Zhao, Z. Fei, R. Scopelliti, P.J. Dyson, *Inorg. Chem.* 43 (2004) 2197; (c) F.E. Hahn, M.C. Jahnke, T. Pape, *Organometallics* 25 (2006) 5927; (d) F.E. Hahn, M.C. Jahnke, *Angew. Chem., Int. Ed.* 47 (2008) 3122. [3]: (a) C.W.K. Gotöttmayr, V.P.M. Böhm, E. Herdtweck, M. Grosche, W.A. Herrmann, *Angew. Chem., Int. Ed.* 41 (2002) 1363; (b) N.M. Scott, S.P. Nolan, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2005) 1815. [4]: (a) W.A. Herrmann, C.P. Reisinger, M. Spiegler, *J. Organomet. Chem.* 557 (1998) 93; (b) J. Schwarz, V.P.W. Böhm, M.G. Gardiner, M. Grosche, W.A. Hermann, W. Heringer, G. Raudaschl-Sieber, *Chem. Eur. J.* 6 (2000) 1773; (c) D.S. McGuinness, K.J. Cavell, *Organometallics* 19 (2000) 741. [5]: T. Weskamp, W.C. Schattenmann, W.C. Spiegler, W.A. Herrmann, *Angew. Chem., Int. Ed.* 37 (1998) 2490.

P12. Modificación de superficies electródicas con Grafeno para determinación de amoxicilina por métodos electroquímicos

Angélica [Hernández](#), [Lizbeth López](#), [Drochss Valencia](#), Universidad Santiago de Cali

Resumen: Se desarrollará un sensor electroquímico para la detección de amoxicilina, a partir de un electrodo de carbón vítreo modificado con grafeno y funcionalizado con catecol. El grafeno será sintetizado usando una oxidación-reducción de grafito, este proceso se conoce como método modificado de Hummers. La película de Catecol-grafeno (CG) sera depositada sobre el electrodo por el método de secado de goteo, usando nafion como agente encorador. Se espera que el electrodo modificado con Nafion-catecol-grafeno pueda mostrar una actividad electroquímica muy alta para la oxidación electrocatalítica de compuestos de interés a diferentes pH. El sensor propuesto puede aplicarse a la identificación y cuantificación de amoxicilina. El análisis de los resultados experimentales puede utilizarse para proporcionar mejores estimaciones de la reproducibilidad experimental y la estabilidad a largo plazo del sensor, así como una alta selectividad sin interferencia de otras especies potencialmente competidoras.

Palabras clave: Sensor Electroquímico, Método Hummers, Síntesis, Grafeno, Amoxicilina.

Introducción: Para la industria farmacéutica la implementación de métodos que permitan la cuantificación y determinación de compuestos químicos es de gran importancia ya que permite el control de calidad de los productos fabricados. [1] Los métodos electroquímicos logran de manera rápida y eficaz la determinación de compuestos, en matrices complejas, con una alta sensibilidad y selectividad. [2] En la industria farmacéutica encontramos diversidad de medicamentos como la amoxicilina (AMX) que tienen un gran impacto en la población que los consume, por ende es de gran importancia que estos medicamentos cumplan con los requerimientos legislativos. La AMX es uno de los antibióticos más usados en el mundo y se emplea contra infecciones bacterianas [3], [4]. Este medicamento se presenta en diferentes presentaciones y diferentes concentraciones. El abuso de este medicamento en los animales ha causado la acumulación de amoxicilina en los alimentos derivados de estos, como lo son la leche, la carne y el pollo. [5] Por lo anterior, es de gran importancia desarrollar un método que me permita detectar y/o cuantificar tanto niveles altos como bajos de AMX, lo que muestra la necesidad de futuros trabajos en este contexto. El propósito del presente trabajo es desarrollar un método electroanalítico alternativo para la determinación de AMX, con el objetivo de mejorar la sensibilidad, interferencias y los tiempos de respuesta de los sistemas convencionales de análisis existentes, satisfaciendo de esta manera las exigencias reglamentarias respecto a los compuestos de estudio.

Metodología: Preparación del Óxido de Grafeno (GO) por el Método de Hummers Modificado: Se realizará una mezcla en un vaso de 250 mL, en constante agitación y a baño frío de: 2,0 g de Grafito en polvo, 1,0 g de nitrato sódico (NaNO_3), 50 mL de ácido sulfúrico concentrado (H_2SO_4). Posteriormente se le adicionara lentamente 6,0 g de permanganato de potasio (KMnO_4), en constante agitación y a una temperatura controlada entre 20 °C y 25 °C; 5 minutos después, se retira del baño frío y el sistema se calentará a 35 °C por 30 minutos; luego se añadirá lentamente 100 mL de H_2O desionizada al sistema y se agitara por 15 minutos. A continuación se agregara una solución (donde el agua utilizada se calienta a 60 °C), de 80 mL al 6% de peróxido de hidrogeno (H_2O_2), esto con la finalidad de reducir el permanganato de potasio (KMnO_4) residual (y se espera hasta que el burbujeo desaparezca). Posteriormente la mezcla se centrifugará a 4000 rpm por 1 hora y el residuo se enjuagara con agua tibia hasta que alcance un pH de 7,00. El polvo obtenido se dispersara en H_2O y se sonicará suavemente por 15 minutos. Finalmente se filtrara, y las trazas negras obtenidas se congelaran y después se secaran en horno al vacío; y de esta forma se obtendrá el polvo de GO. [6] Preparación de la reducción térmica del Óxido de Grafeno: Se dispersara GO (1mg/mL) en agua desionizada y se agitara mecánicamente durante 1 hora para obtener una solución homogénea. Posteriormente se adicionara borohidruro de sodio (NaBH_4) 10 mM. La mezcla se colocara en un baño de aceite a 90 °C durante 24 horas. La reducción del GO se precipita gradualmente como un sólido negro. Este producto se lavara con abundante agua y después se secara mediante liofilización. 5 mL de la dispersión acuosa del GO (1 mg/mL) se añaden a un erlenmeyer de 500 mL y se dejaran secar a temperatura ambiente. El GO formara una película en el fondo del matraz. Calentar durante 2 minutos. Una vez terminada la reacción el producto tendrá un cambio de coloración. Guardar una muestra para su caracterización. [7] El producto obtenido se caracterizara con un análisis de espectroscopia de infrarrojo (FT-IR), con microscopia electrónica de barrido (SEM), Rayos X y Espectroscopia Raman. [8] Preparación del electrodo modificado: Sobre una superficie de carbón vítreo (u oro), previamente pulida con alúmina (3,0 μm) y/o polvo de diamante, colocar 3,0 μL de una suspensión de grafeno en una mezcla de DMF + Nafion (1:1), esta suspensión se evaporará en la presencia de un flujo de aire caliente por 25 minutos, después de evaporado el disolvente, se hará una segunda y tercera adición de la suspensión sobre la superficie del electrodo, de tal forma que se obtenga una superficie completamente modificada. Al terminar la modificación, el electrodo se colocará en un desecador por 12 horas antes de su utilización. Preparación de la muestra: Se realiza la preparación de la muestra para análisis de acuerdo a los métodos estipulados por la farmacoepa Americana y/o Europea.

Referencias: [1] The analytical determination and electrochemiluminescence behavior of amoxicillin. Zhang, Li-Hua Shen. Hong-Ni Wang. Pei-Jing Chen. Chun-Xia Yu. Yao-Dong Liang. Cheng-Xiao. 199-205, s.l. : Journal of food and drug analysis 24, 2016.

[2] Beyond graphene: Electrochemical sensors and biosensors for biomarkers detection. Favero., P. Bollella. G. Fusco. C. Tortolini. G. Sanzò. G. 152-166, s.l. : Biosensors and Bioelectronics, 2016.

P13. Síntesis y caracterización de compuestos mono y polinucleares de Cobre (II) y Cobalto (II) con derivados N-bencilados de la L-Val y L-Phe

Damian Andrés Amaya Flórez, Francis Dayán Rivas García, Edwin Flórez, Yenny Avila,
Universidad Santiago de Cali.

Resumen ejecutivo: Se diseñará la síntesis eficiente de compuestos coordinados de cobre (II) y cobalto (II) con amino ésteres N-bencilados con el fin de utilizar el nitrógeno de estas especies orgánicas como donador potencial de electrones en la esfera de coordinación.

Resumen: Se pretende desarrollar rutas de síntesis para la formación de compuestos coordinados mononucleares de Cu(II) y polinucleares de Co(II) con derivados N-bencilados de amino ésteres. Se considera obtener inicialmente los compuestos con un único centro metálico en base a la mezcla con los derivados de la L-Val y L-Phe en disolventes apropiados y bajo atmósfera inerte para promover el avance de la reacción. El reto radicará en condicionar la síntesis hacia la participación principal del nitrógeno de los amino ésteres en la esfera de coordinación, situación que será monitoreada por técnicas espectroscópicas (IR-FT, UV-VIS), AE y susceptibilidad magnética. La difracción de rayos X será utilizada como técnica de caracterización para los complejos mononucleares de Cu (II) y polinucleares de Co(II) en estado cristalino.

Palabras clave: amino ésteres, cobre, cobalto.

Introducción: Los metales y los compuestos que los contienen han sido ampliamente estudiados debido a sus importantes funciones enzimáticas, estructurales o reactivas en los procesos biológicos, y en el uso a nivel tecnológico; los complejos de cobre (II), debido a su naturaleza biológicamente oxi-reductora y la capacidad de interactuar con las proteínas nucleares y el ADN se han referido como agentes antineoplásico potenciales.^{1 2 3} Por otra parte, los complejos de cobalto (II) han demostrado tener propiedades de tipo súper paramagnético, exhibiendo tanto una susceptibilidad magnética de corriente alterna fuera de fase dependiente de la frecuencia como una histéresis en un diagrama de magnetización frente a un campo magnético aplicado. Debido a estas propiedades que presentan los complejos de cobalto (II) han despertado un gran interés debido a su potencial para el almacenamiento de datos y procesamiento de datos.⁴ En cuanto al ligante, los aminoácidos se han referido como acarreadores del centro metálico hacia las células malignas, situación que además aumenta la biocompatibilidad⁵. Sin embargo, los amino ésteres como ligantes de compuestos coordinados con propiedades óptico magnéticas es un campo poco explorado, situación que conllevará al estudio de versatilidad de los amino ésteres. Lo anterior ha despertado gran interés en el desarrollo nuevos agentes metálicos, que con miras a potenciales aplicaciones requiere inicialmente productos de fácil obtención, bajo costo y alto rendimiento. Por tal se estudiará la reacción de complejación de cobre y cobalto con derivados N-bencilados de amino ésteres.

Referencias: Dong, J.; Li, L.; Liu, G.; Xu, T.; Wang, D. Synthesis, Crystal Structure and DNA-Binding Properties of a New copper(II) Complex with L-Valine Schiff Base and 1,10-Phenanthroline. *J. Mol. Struct.* **2011**, 986 (1), 57–63.

- (2) Li, A.; Liu, Y.-H.; Yuan, L.-Z.; Ma, Z.-Y.; Zhao, C.-L.; Xie, C.-Z.; Bao, W.-G.; Xu, J.-Y. Association of Structural Modifications with Bioactivity in Three New copper(II) Complexes of Schiff Base Ligands Derived from 5-Chlorosalicylaldehyde and Amino Acids. *J. Inorg. Biochem.* **2015**, *146*, 52–60.
- (3) Bravo-Gómez, M. E.; Campero-Peredo, C.; García-Conde, D.; Mosqueira-Santillán, M. J.; Serment-Guerrero, J.; Ruiz-Azuara, L. DNA-Binding Mode of Antitumoral Copper Compounds (Casiopinas®) and Analysis of Its Biological Meaning. *Polyhedron* **2015**, *102*, 530–538.
- (4) Ávila-torres, Y.; López-sandoval, H.; Mijangos, E.; Quintanar, L.; Rodríguez, E. E.; Flores-parra, A.; Contreras, R.; Vicente, R.; Rikken, G. L. J. A.; Barba-behrens, N. Structure and Magnetic Properties of Copper (II) and Cobalt (II) Coordination Compounds Derived from Optically Active Tridentate Ligands. **2013**, *51*, 298–306.

P14. Implementación de un sistema de obtención de agua tipo II para ser usada en los laboratorios de investigación y docencia de la Universidad Santiago de Cali

Lizeth Arboleda Jaramillo, Stephania Arias González, Jorge Enrique Catillo Ayala,
Universidad Santiago de Cali

Resumen ejecutivo: Se realizará la implementación de un sistema de tratamiento para obtener agua tipo II que se utilizará en las actividades de investigación y docencia de la Universidad Santiago de Cali. Una de las mayores fortalezas y beneficios que brinda la Universidad son los espacios que ofrece para el crecimiento académico experimental de las carreras, entre estos se encuentran los laboratorios, los cuales tienen dentro de sus programas de trabajo, variables fisicoquímicas y microbiológicas que acompañan los procesos formativos y de investigación de un gran número de programas académicos de la Universidad, este aspecto hace que una de las mayores demandas en términos de reactivos de consumo, sea el agua tipo II, utilizada para el manejo de soluciones, y material de laboratorio.

Resumen: En el proyecto se realizara una evaluación de la calidad actual del agua, para elaborar el diseño de nueva planta de tratamiento la cual permitirá la obtención de agua tipo II. Actualmente la producción de agua tipo II, es uno de los procesos a nivel institucional que genera mayor demanda de agua potable, otro de los objetivos de este proyecto, es garantizar el uso eficiente del agua y mantener una gestión adecuada de la misma, no solo para preservar los recursos hídricos, sino también para brindar análisis de laboratorio de alta calidad.

Palabras clave: desmineralizador, intercambio iónico, agua potable, resinas catiónicas, resinas iónicas.

Introducción: ¿El agua tipo II utilizada en los laboratorios de la Universidad Santiago de Cali, cumple con los estándares para investigación y análisis?, la calidad de agua tipo II, requerida en los laboratorios, los costos asociados a la producción de la misma y el desperdicio de agua potable para la obtención de agua de alta calidad, son algunos de los problemas que presentan los laboratorios de la universidad

Es importante incorporar sistemas eficientes, de bajo consumo de agua, económico y de poco mantenimiento, además de la obtención de reactivo de alta calidad. El agua es un elemento escaso y vulnerable, esencial para la vida y el progreso social, probablemente es el único recurso natural que compromete la vida humana en todos sus aspectos. En consecuencia, la supervivencia de la humanidad depende en gran medida del uso prudente, armónico, eficiente y sustentable de los recursos hídricos del planeta. La importancia de optimizar el sistema de desmineralización actual en la Universidad Santiago de Cali, radica en solucionar la problemática que está tolerando los laboratorios de dicha Universidad a causa de la mala calidad del agua, por lo que resulta oportuno llevar a cabo procesos y operaciones unitarias donde se remuevan las sales de calcio y magnesio, sólidos suspendidos y disueltos que están presente en ésta. Todo con el fin de que los estudiantes de pregrado e investigación de esta Universidad puedan llevar a cabo las prácticas de laboratorio; y poder ahorrar en gasto de energía y agua el proceso de desmineralización de la misma ya que esta no es agua tipo II.

Resultados: -Se obtendrá agua tipo II de alta pureza, la cual presente características fisicoquímicas requeridas por la normatividad establecida.

- se reducirá el desperdicio de agua potable por medio de un sistema que genere más economía y mayor calidad.

-Este proyecto aporta a las soluciones en gran escala a las necesidades de la universidad ya que esto contribuye a los diferentes análisis y uso investigativo de la universidad, se benefician las diferentes carreras que hay en ciencias básicas, (química y microbiología), y en otras facultades.

Referencias: Tipos de agua, disponible en :<http://www.elgalabwater.com/es/applications-es/water-quality-es>, APHA-AWWA-WPCF. 1992. Métodos Normalizados para el Análisis de Aguas Potables y Residuales. 17ed. España. Díaz de Santos. p. 2-25 - 4-137, Julián Lebrato Martínez, 2002. Grupo de Tratamiento de Agua Residuales. (en línea). España, Grupo Tarita, Membrana de Intercambio Iónico. 2001. (en línea). S.i, s.n.t. Consultado 12 sept 2016. Disponible en <http://www.membrionit.com>, OMS (Organización Mundial para la Salud, GI). 1998. Guía para la calidad del agua potable: Vigilancia y control de los abastecimientos de agua a la comunidad. 2ed, Paniagua Calderón, J.J. y Otros. / 1994 / Diseño y Construcción de un Sistema de Desmineralización de agua para uso de los Laboratorios de la Escuela de Ingeniería Química. / Ingeniero Químico / San Salvador, El Salvador, / Universidad de El Salvador. / 257p.

P15. Interacciones intermoleculares de la proteína de membrana Arf*GTP con Potasio y Glicerol, componentes mayoritarios de la Vinaza de Caña de Azúcar.

Fernando Bonilla Millán, Oscar Eduardo Rojas Alvarez. Qco. M.Sc, Universidad Santiago de Cali

Resumen ejecutivo: Se estudiaron las interacciones intermoleculares entre la proteína Arf*GTP contenida en la vinaza de caña de azúcar con Potasio y Glicerol, componentes mayoritarios y aprovechables (como suplemento alimenticio animal y fertilizante) con el fin de comprender y evaluar la estabilidad y encontrar los distintos momentos de afinidad electrónica entre los ligandos (potasio y glicerol) con respecto a la carga protéica, proveniente de la *Saccharomyces Cerevisiae*.

Resumen: La súper producción de alcohol carburante en Colombia, ligada a la Ley 693 de 2001 y la resolución 41072 del 30 de Septiembre de 2015 del Ministerio de Minas y Energía, actualmente está permitiendo verter al medio ambiente aproximadamente 13.365 millones de litros por día de vinaza de caña de azúcar como subproducto de la industria alcohólica y azucarera, gran parte de esta cifra está siendo usada controladamente en la producción de 800 Toneladas diarias de compost por la industria agrícola como agente fertilizante y remediador del pH en suelos de cultivo (Revista Técnica No. 28, Julio 2012), todo lo anterior como respuesta pronta de la Industria a la producción elevada de vinaza. Sin embargo se estima un crecimiento en los próximos años de más del 20% en la producción de vinaza de caña de azúcar debido entre otros factores al incremento del 5% en alcohol carburante (Proyecto de Ley 1715 de 2014 por medio del cual se regula la interacción de energías renovables no convencionales al sistema energético nacional), crecimiento demográfico y el crecimiento del parque automotor (Informe del sector automotor a Octubre de 2015), este posible crecimiento significativo ha despertado la necesidad de buscar nuevos usos de este subproducto dentro de los que tenemos: Aditivo para asfaltos y concretos, combustible generador de calor o electricidad y suplemento alimenticio para animales.

Este proyecto aborda únicamente el uso de la vinaza como suplemento alimenticio para animales, resaltando el contenido de proteína del 8% (Scull, I., Savón, L., Gutiérrez, O., Valiño, E., Orta, I., Mora, P. O., Noda, A. (2012).) proveniente de la levadura como resultado del proceso de fermentación lo convierte en un muy buen prospecto, pero la obtención en el proceso de otros compuestos mayoritarios (como el Potasio y el Glicerol) puede traer problemas estomacales dependiendo de las concentraciones suministradas. Se pretende entonces modelar molecularmente en fase gaseosa y con solvente explícito en una computadora, una proteína contenida en la membrana celular de la *saccharomyces cerevisiae* conocida como Arf*GTP capaz de sobrevivir al proceso de apoptosis, usando técnicas de modelado comparativo en la mecánica molecular clásica y newtoniana, de esta misma forma se analizarán las interacciones moleculares entre la biomolécula en un complejo con sales de potasio y glicerol donde mediante la técnica de simulación en computadora llamada dinámica molecular clásica que utiliza ecuaciones de Newton podremos predecir las propiedades y el comportamiento del sistema químico en forma numérica, observar las interacciones más fuertes en el complejo y discutir sobre el efecto (positivo o negativo) que estas conllevan a la hora de ser usado en la industria, también se pretende ampliar y aclarar aún más el conocimiento molecular del comportamiento de estos nutrientes y la naturaleza de estas interacciones.

Los resultados de este proyecto demostrarían afinidades e interacciones moleculares entre el contenido proteico, orgánico e inorgánico de la vinaza de caña de azúcar, resultados que la Industria podría utilizar para tomar decisiones de separación química o física de componentes.

Palabras clave: Dinámica Molecular; Interacciones intermoleculares, Vinaza

Introducción: La palabra “vinaza” de destilería se deriva del latín *vinacaceus* y originalmente conocida por vino de levadura desde el siglo XIX. Aunque, para los inicios del siglo XX en la Unión Europea, el nombre de vinaza, comienza a ser un término común para llamar a los concentrados fermentados de mieles de remolacha azucarera (Lewicki 2001). La vinaza es el residuo líquido después de la destilación del mosto de la fermentación de etanol. Es de color café oscuro, con un alto contenido de materia orgánica, de naturaleza ácida y de olor característico (Saura et al. 2008) que se destacan por presentar ácidos orgánicos, levaduras, vitaminas y minerales según Mc-Pherson et al. (2002) y contiene poli y oligosacáridos resistentes que pudieran provocar una respuesta positiva en los animales (Tungland & Meyen 2006). La vinaza de destilería de alcohol a partir de la caña de azúcar no es tan rica en nutrientes comparada con la de remolacha pero su pH, su contenido de minerales y vitaminas fueron las razones por la que su estudio fue importante (Lewicki 2001). Estudios desarrollados por el Instituto de Ciencia Animal de la Habana Cuba en el año 2012, donde evaluaron la productividad y la salud de pollitas de reemplazo y ponedoras con el empleo de la vinaza concentrada de destilería como aditivo dietético, demostró que la presencia de ácidos orgánicos, fenoles, levaduras y lactobacilos elevan las potencialidades de la vinaza de caña de azúcar para ser utilizada como aditivo en la producción avícola, también la inclusión del 1 % de vinaza concentrada en la dieta de gallinas ponedoras produjo una mejora en la producción de huevos, sin embargo concentraciones superiores generaban decrecimiento productivo, también lo evidenció Lewicki (2001) que realizó una reseña de los diferentes tipos y usos de las vinazas. Mencionó, que la vinaza deshidratada, a partir de remolacha azucarera, puede constituir desde el 1 hasta el 3 % de la fórmula para animales mono gástricos. Estas fueron consideradas como estimulante del apetito y amortiguador de la pulverulencia en las harinas y como factor limitante el alto contenido de potasio lo que impidió la adición en niveles superiores pues puede producir diarreas. La Química Computacional estudia los problemas químicos a nivel microscópico (atómico- molecular) utilizando las ecuaciones proporcionadas por la Mecánica Cuántica (que permite caracterizar la estructura electrónica de átomos y moléculas) y la Mecánica Estadística (que permite obtener propiedades macroscópicas a partir de los constituyentes microscópicos).

La Química Teórica que se preocupa de la descripción matemática de la Química, derivando la Química Computacional que se refiere a su implementación computacional para la resolución de las ecuaciones correspondientes. La complejidad de resolución de las ecuaciones propuestas obliga a abordar el estudio mediante la introducción de aproximaciones y el empleo de ordenadores. La química computacional es una rama de la química teórica y de la química cuántica. El objetivo de la química computacional es producir y utilizar programas informáticos para el estudio de las propiedades (como energía, momento dipolar, frecuencias de vibración) de moléculas. En química teórica, los químicos y los físicos desarrollan algoritmos y teorías que permiten predicciones precisas de propiedades atómicas o moleculares, o caminos para las reacciones químicas. Los

químicos computacionales usan los programas y metodologías existentes y los aplican a problemas químicos específicos, Así la química computacional puede ayudar a los químicos experimentales o los puede desafiar a encontrar objetos químicos totalmente nuevos.

La química computacional incluye aspectos como:

- El modelado molecular.
- Los métodos computacionales.
- El diseño molecular asistido por ordenador.
- Las bases de datos químicas.
- El diseño de síntesis orgánica.
- La búsqueda de datos en bases químicas

Es por esto que el modelado molecular es una técnica relativamente nueva de estudio de la relación entre la estructura molecular y las propiedades químicas macroscópicas de la materia. La base del modelado molecular es el uso de métodos computacionales para simular, explicar o predecir la estructura tridimensional y las propiedades fisicoquímicas de las moléculas, con la ayuda esencial de métodos gráficos. Estas técnicas se inscriben dentro del área que recibe el nombre de Química Computacional. El nombre de modelado molecular se aplica a un conjunto de métodos que pretenden predecir las propiedades y el comportamiento de los sistemas químicos en forma numérica apoyándose en entornos gráficos para la manipulación de moléculas, y es mayormente indistinguible de lo que se conoce como química computacional, si bien este nombre implica más bien el conjunto de estudios que hace hincapié en lo numérico más que en lo gráfico. El objetivo fundamental de la química computacional (o, en general, el modelado molecular) es conseguir explicar los fenómenos químicos observados en el laboratorio y predecir otros fenómenos que aún no han sido observados, todo ello recurriendo a técnicas numéricas que permitan resolver las ecuaciones planteadas en los modelos surgidos de la aplicación de un determinado sistema de leyes físicas fundamentales a los sistemas moleculares. Actualmente los estudios de caracterización de la Vinaza de caña de azúcar se limitan a determinar las concentraciones de elementos mayores y menores (ejemplo porcentajes de Calcio, Magnesio, Fosforo, Potasio, etc.), algunas caracterizaciones son un poco más específicas donde logran una composición de aminoácidos presentes como lo evidencia la siguiente tabla tomada del Cuban Journal of Agricultural Science, Volume 46, Number 4, 2012, Physic-chemical composition of concentrated vinasse for their assessment in animal diets.

Aminoacids	g100g ⁻¹ Sample1	g100g ⁻¹ Sample 2	g100g ⁻¹ FAO pattern ¹
Aspartic acid	7.69	8.85	-
Threonine	5.66	7.31	2.9
Serine	4.64	4.81	-
Glutamic acid	12.11	13.23	-
Prolina	4.98	6.02	-
Glycine	4.08	3.61	-
Alanine	3.74	2.50	-
Cysteine	1.81	1.81	2.0
Valine	5.66	7.13	1.3
Methionine	4.53	nd	2.3
Isoleucine	6.79	5.76	4.3
Leucine	4.53	3.10	4.9
Tyrosine	6.23	4.99	2.9
Phenylalanine	5.09	4.73	2.9
Histidine	5.09	4.72	-
Lysine	9.96	9.28	4.9

Sin embargo estudios que usen ordenadores para simular interacciones intermoleculares usando técnicas de modelamiento y dinámica molecular entre los componentes de la Vinaza de caña de azúcar, por el momento no han sido publicados.

Resultados: Se realizó y cumplió el primer objetivo específico, generando y validando las estructuras de ligando (solamente glicerol hasta el momento) y proteína. Para la validación de estas estructuras se exponen a continuación una serie de gráficos que ayudarán a comprender la importancia de esta validación para poder realizar los estudios de interacciones. En el apartado correspondiente a la adecuación de parámetros y pretratamiento sistemático de las condiciones, se corrigió en base a la topología y los scripts (MacKerell, Jr., A. D.; Bashford, D.; Bellott, M.; Dunbrack Jr., R.L.;Evanseck, J.D.; Field, M.J.; Fischer, S.; Gao, J.; Guo, H.; Ha, S.;Joseph-McCarthy, D.; Kuchnir, L.; Kuczera, K.; Lau, F.T.K.; Mattos,C.; Michnick, S.; Ngo, T.; Nguyen, D.T.; Prodhom, B.; Reiher, III,W.E.; Roux, B.; Schlenkrich, M.; Smith, J.C.; Stote, R.; Straub, J.;Watanabe, M.; Wiorkiewicz-Kuczera, J.; Yin, D.; Karplus, M. All-atomempirical potential for molecular modeling and dynamics Studies ofproteins. *Journal of Physical Chemistry B*, 1998, 102, 3586-3616.) de uso libre provistos por los desarrolladores de las herramientas computacionales (VMD, NAMD); se corrieron dinámicas moleculares desde 2500 femtosegundos (fs) hasta 1'000.000 fs; se utilizaron parámetros de restricción y optimización; específicamente se trabajó a presión (1 atm) y temperatura constante (328°K o 54.85°C), tomando los enlaces de las moléculas que no son agua como rígidos (para estudiar específicamente fenómenos superficiales, interacciones débiles o de adsorción) haciendo recopilación de datos de estado de minimización, estado de velocidad, estado de posición, energías (cinética, potencial, de enlace y demás, expuestas en las imágenes anexas), estados de temperatura de enlaces, entre otras.

Referencias: Alves, P. R. L., Natal-da-Luz, T., Sousa, J. P., & Cardoso, E. J. B. N. (2015). Ecotoxicological characterization of sugarcane vinasses when applied to tropical soils. *Science of the Total Environment*, 526, 222–232. <http://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2015.03.150>

ANDI, & FENALCO. (2015). *Informe Del Sector Automotor*. Retrieved from http://web.econometria.com.co/images/Vehiculos/Avance_Abr_2015.pdf (22 de Noviembre de 2015), Bermúdez, I. P., & Garrido, N. (2006). Aprovechamiento integral de vinazas de destilerías Una revisión actual. *Ingeniería Química*, 129–133, Campos, C. R., Mesquita, V. A., Silva, C. F., & Schwan, R. F. (2014). Efficiency of physicochemical and biological treatments of vinasse and their influence on indigenous microbiota for disposal into the environment. *Waste Management*, 34(11), 2036–2046. <http://doi.org/10.1016/j.wasman.2014.06.006>

P16. Extracción etérea y alcohólica e identificación cualitativa de flavonoides en la guasca (*Galinsoga Parviflora*)

Carlos F. Londoño, Javier M. Posada, Universidad Santiago de Cali

La *Galinsoga parviflora* es una hierba utilizada en la cocina colombiana y en la medicina tradicional como antiinflamatorio. Actualmente no se encuentran estudios directos sobre sus propiedades fitoquímicas, por lo que se propone realizar una extracción etérea y alcohólica, por medio de método soxhlet, e identificación de los posibles flavonoides, terpenos y fenoles presentes en el extracto de la planta, mediante los ensayos de shinoda, de Zn/HCl, de ácido sulfúrico, espectrofotometria uv-vis para determinación de flavonoides; para la determinación de terpenos y esteroides se realizan las pruebas de liebermann-burchard y de baljet y para los fenoles la prueba con ión férrico; todo esto con el fin de posteriormente profundizar en la investigación y la posible extracción del aceite esencial y caracterización de los compuestos antioxidantes de esta planta.



Fig. 1. Extracción del extracto etéreo y alcohólico de la *Galinsoga parviflora* por medio del método soxhlet.

Palabras clave: extracción, pruebas fotoquímicas, galinsoga parviflora,

P17. Obtención de Bioplástico a Partir de Cascara de Banano

Cindy Vanessa Castellanos, Andrés Amaya Florez, Carlos David Grande, Universidad Santiago de Cali

Resumen ejecutivo: Obtención de bioplástico a partir de un residuo agrícola empleando microorganismos específicos.

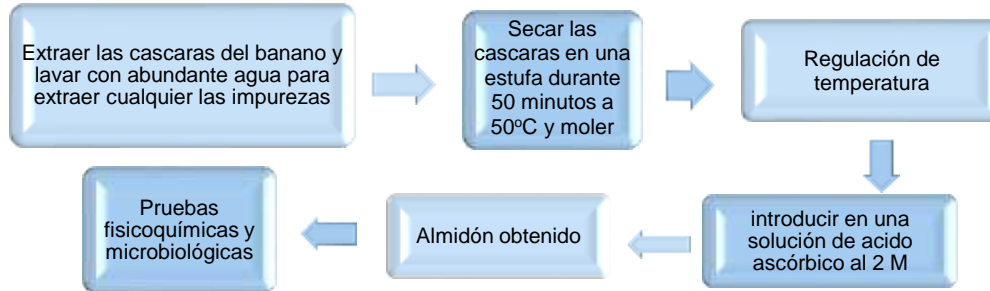
Resumen: El presente proyecto tiene como objetivo fundamental obtener un bioplásticos a base de almidón extraído de la cascara de banano, las cuales son considerados residuos agrícolas, para utilizarlo como materia prima para la producción de bioplásticos. La extracción del almidón, se inicia con el rayado del endocarpio, desechándose el exocarpio; una vez obtenido el rayado se procede a su inmersión en solución acida. Posteriormente se procederá a la elaboración del bioplásticos a partir de un microorganismo seleccionado.

Palabras clave: Bioplastico, residuos agrícolas, almidon

Introducción: La industria bananera en colombiana ocupa 48325 hectáreas actualmente distribuidas en el Urabá y Magdalena 35.425 y la guajira 12.900. El Bioplásticos, fabricado a partir de almidón de plátano comparte ciertas características con los elaborados a través de derivados de petróleo. La mayor diferencia entre el plástico que actualmente se fabrica y el producido a base de almidón, es que el segundo es biodegradable y no toxico, una vez degradado puede usarse incluso como material de compostaje. El uso de los materiales bioplásticos se está extendiendo en varios sectores como la medicina, alimentación, juguetes y por supuesto en bolsas biodegradables.



Metodología:



Referencias:

- Vásquez, J.A. (2010). Obtención de ácido cítrico por fermentación con aspergillus nigger. Mbaga, 135-147

P18. Dinámica molecular de un polipirrol como sensor electroquímico en la detección de L-triptófano.

Maribel Holguín, Oscar Eduardo Rojas Álvarez, Universidad Santiago de Cali

Resumen:

En el mundo, miles de millones de dólares son gastados al año en detectores químicos y biológicos, ya que, a diferencia de los análisis realizados en laboratorios por medio de equipos, estos son mucho más rápidos, de bajo precio y fácil operación por lo que se presentan como una alternativa en la detección y cuantificación de diferentes especies. Los polipirroles son polímeros conductores electrónicos que han sido usados en estudios para la determinación de diferentes analitos por medio de MIPs (*molecular imprinting polymers*). Estudios en dinámica molecular con polipirroles corroboran las propiedades electroquímicas de este polímero y su comportamiento oxidoreductor por lo que se convierte en un buen material para ser usado en la determinación de analitos como es el caso del L-triptófano presente en las enfermedades de tipo demencial como el Alzheimer.

Palabras clave: Polipirrol, Dinámica molecular, Orientación, Triptófano, CHARMM, modelamiento molecular

Introducción: El triptófano es un aminoácido esencial en los seres humanos y también es un precursor de la serotonina, melatonina y niacina (6). La dopamina es un importante neurotransmisor monoamina en el sistema nervioso central de mamíferos. Los bajos niveles de dopamina están relacionadas con trastornos neurológicos tales como la enfermedad de Parkinson y la esquizofrenia por lo tanto, es esencial desarrollar métodos simples y rápidos para la determinación de estas moléculas biológicas en el análisis de rutina. (6) Los MIPs (*molecular imprinting polymers* MIPs) es una herramienta de bajo costo y sencilla producción ya que utiliza materiales con alta afinidad y selectividad hacia una molécula o grupo de moléculas. La síntesis de polímeros de impresión se basa en la polimerización de monómeros funcionales y un reticulante alrededor de una plantilla donde se determinan sitios de reconocimiento con la complementación funcional y forma de la plantilla (7). Un típico sensor químico consiste en dos componentes principales: los materiales quimiosensoriales o receptores que se relaciona con el analito objetivo y un transductor eficiente que convierte eventos de unión en una señal de salida en relación a la concentración del analito en la muestra donde la eficiencia de estos dependerá en gran medida de la selectividad y la sensibilidad del material, sin embargo, cuando hay pequeñas propiedades de área de superficie y de la superficie no sintonizable de transductores limitan en gran medida la eficiencia de sensores químicos, especialmente para la detección de analitos ultratrazas (1). Para el desarrollo de detectores químicos y biológicos los polímeros conductores han sido el foco de atención al ser polímeros conductores electrónicamente presentan propiedades similares a las de los metales. Además, pueden ser sintetizados no solo químicamente sino también por medio de electroquímica, donde cuyas condiciones determinan la electroactividad del polímero así como su transición redox dependiendo del electrolito soporte utilizado en la electrosíntesis. Los polímeros conductores pueden lograr generalmente en solución cualquier estado de oxidación y reducción bajo condiciones

controladas(2). El comportamiento y propiedades electroquímicas del polipirrol como un material blando, húmedo y amorfo ha sido objeto de interés para ser controladas electroquímicamente y han sido estudiadas por medio de simulaciones de dinámica molecular. Estas, están relacionadas con los procesos de oxidoreducción donde este cambia de forma reversible de estado reducido a oxidado en el cual los contraiones penetran en el polímero para mantener así la estabilidad del sistema haciendo variar entre otras cosas, sus características físicas (8-9). Se han registrado estudios sobre el uso de polipirrol para la generación de MIPs en la determinación de analitos como paracetamol (10), ácido ascórbico (11), sulfametoxazol (12) y en aminoácidos como el L-aspartato (13) y el triptófano (14) en los que se evidencian casos de enantioselectividad. La química computacional hace parte de la ciencia que comprende las áreas de química, biología y física unidas a la computación, permitiendo la investigación de átomos, moléculas y macromoléculas mediante un sistema de ordenadores (15). Este tipo de análisis generalmente se llevan a cabo cuando la investigación de laboratorio es inapropiada, impracticable o imposible, debido a las condiciones extremas de dichos experimentos (altas temperaturas, condiciones de vacío, etc.), o bien a los altos costo que se generan. (16). El objetivo principal de la química computacional es predecir todo tipo de propiedades moleculares de sistemas químicos utilizando la fisicoquímica, la física molecular y la física cuántica, y empleando una gran variedad de técnicas teóricas en constante desarrollo en donde se incluyen aspectos como, el modelado molecular, métodos computacionales, diseño molecular asistido por ordenador, las bases de datos químicas o el diseño de síntesis orgánicas (17-18). CHARMM es un programa de modelado y simulación molecular versátil diseñado para proporcionar una amplia aplicación a la simulación de sistemas de muchas partículas, e incluye un amplio conjunto de campos de fuerza para simular las biomoléculas, como proteínas, ácidos nucleicos, carbohidratos, lípidos, sus ensamblajes, y las pequeñas moléculas que interactúan con estos objetivos.(19) El modelado molecular (MM modeling molecular) se consideran las propiedades de las moléculas en tres dimensiones y es importante entre otros, el análisis conformacional, la mecánica cuántica, los campos de fuerza, la termodinámica estadística y los gráficos moleculares interactivos. Estos últimos, permiten la representación y manipulación de las moléculas en tres dimensiones, lo que proporciona una información espacial que es esencial para comparar moléculas y para estudiar la interacción entre ligandos y receptores macromoleculares (20) Por otra parte, la dinámica molecular (MD, Molecular dynamics) es un tipo de simulación molecular computacional se desea a menudo para explorar las propiedades macroscópicas de un sistema a través de simulaciones microscópicas y que permite analizar el comportamiento o evolución de un sistema a través del tiempo, calculando las fuerzas entre los átomos que lo conforman mediante las ecuaciones del movimiento de Newton. Operacionalmente, es un método para generar las trayectorias de un sistema compuesto de N partículas por integración numérica directa de las ecuaciones de movimiento de Newton, con especificaciones de un potencial de interacción interatómico de condiciones iniciales y de frontera adecuadas el cual permite establecer una conexión entre las propiedades microscópicas y macroscópicas del sistema. Por medio de MD, se pueden calcular diferentes propiedades fisicoquímicas del sistema como la energía libre, entropía, solubilidad, viscosidad, presión, temperaturas de cambio de fase, y en sistemas biológicos, permite medir fuerzas de interacción entre sistemas de ligando-Proteína y dianas biomoleculares o receptores, e incluso, describir el comportamiento de una proteína y moléculas complejas bajo ciertas condiciones, además de incluir disolventes, iones o la

incorporación de entidades químicas (metales, azúcares, cofactores, grupos prostéticos) (21). La elección de los parámetros del ensamble bajo la cual se debe realizar la simulación molecular se determina a partir del tipo de problema que se desea tratar, donde el tipo de ensamble puede llegar a influir en los cálculos promedio de las magnitudes termodinámicas. Existen diferentes conjuntos de ensamble entre los cuales está el microcanónico (N, E, V constantes), el ensamble de Montecarlo o canónico (N, V, T) y ensamble isobárico-isotérmico (T, P, N) (22)

Resultados: A pesar de se presentaron algunas interacciones intermoleculares principalmente entre nitrógeno e hidrogeno de ambas moléculas, no representan un enlace lo suficientemente fuerte como para establecer un acomplejamiento estable. Estos resultados se ven reflejados a continuación de manera experimenta por métodos de determinación de fluorescencia. Sin embargo, la fluorescencia de una solución acuosa de L-triptófano y pirrol permite concluir que no existe la formación del precomplejo ya que el espectro obtenido es prácticamente la suma de los dos espectros, por lo tanto, cada molécula (aminoácido y monómero) se comportan como si no sintiera la presencia de la otra en la solución acuosa y llevan a cabo su proceso de interacción con la radiación electromagnética de forma independiente Para la continuidad de la investigación se encuentra en desarrollo la evaluación de la interacción por medio de dinámica molecular del aminoácido y el pirrol polimerizado con un total de hasta 10 monómeros en medio solvatado y al vacío.

Referencias:

- (1) Guijian Guan, B. L. (2008). Imprinting of Molecular Recognition Sites on Nanostructures and Its Applications in Chemosensors. *Sensor*, 8291-8320. Kutner, P. S.-L. (2012). Electrochemically synthesized polymers in molecular imprinting for chemical sensing. *springer*, 3177–3204
- (2) Diego A. Forero, B. B. (2006). Analysis of functional polymorphisms in three synaptic plasticity-related genes (BDNF, COMT AND UCHL1) in Alzheimer's disease in Colombia. *sciencedirect*, 334–341
- (3) Randall J. Batemana, T. L. (2016). The DIAN-TU Next Generation Alzheimer's prevention trial: Adaptive design and disease progression model. *sciencedirect*.

P19. Adsorción y movilidad de cobre en un suelo andico

Jose Alexander Jimenez, Leydi Johanna Conú, Edier Humberto Pérez,
Universidad del Cauca

Resumen: Los suelos andicos del departamento del Cauca se caracterizan por tener un pH fuertemente ácido el cual influye en otras características físicas y químicas entre ellas la textura, la capacidad de intercambio catiónico (CIC) y la acumulación de materia orgánica (MO) de ahí su elevado contenido de sustancias húmicas. El suelo analizado al estar en una zona de amortiguamiento de paramo con bajas Temperaturas permite una descomposición lenta y acumulación de MO. El Cu en forma de oxicloriguro de cobre presente en los herbicidas que llega al suelo es atrapado por la MO generando complejos organominerales que no se liberan fácilmente debido a las características del suelo y a las condiciones ambientales de la zona de estudio evitando una posible contaminación por este metal.

Palabras clave: Cobre, isotermas, absorción, materia orgánica

Introducción: El uso indiscriminado de productos agroquímicos a base de cobre como fertilizantes y control de plagas, ha generado un riesgo potencial de acumulación del mismo en el suelo por lo cual, se hace de gran importancia la evaluación de parámetros como la absorción y movilidad de este metal, que permita determinar un riesgo potencial por la acumulación de cobre en el suelo, pues si bien el cobre es un micronutriente esencial para el desarrollo y crecimiento de las plantas, la acumulación del mismo puede llegar a niveles tóxicos y afectar el ecosistema.

Resultados: En la caracterización física y química de los suelos se registraron valores de pH entre 4.12 – 6.4; CO entre 8,0 -11,0 %; CIC entre 51-64 meq/100g y mediante espectroscopia de absorción atómica (EAA) se determinó Cu total entre 63-67mg/Kg de suelo y Cu intercambiable entre 0.04-0.09 mg/kg suelo. El tiempo de equilibrio para la adsorción se determinó en 14 horas. Las isotermas de adsorción de cobre en suelo y MOH se ajustaron a la ecuación de adsorción de Freundlich, con porcentajes de adsorción del 90% para suelo y 95% para MOH.

Referencias: IGAC (Instituto Geográfico Agustín Codazzi), Métodos analíticos del laboratorio de suelos, Sexta edic. Bogotá, 2006. L. C. Ferreira, J. Scavroni, J. R. V. da Silva, A. C. Cataneo, D. Martins, and C. S. F. Boaro, “Copper oxychloride fungicide and its effect on growth and oxidative stress of potato plants,” *Pestic. Biochem. Physiol.*, vol. 112, no. 1, pp. 63–69, 2014. Arboleda, C. A., Martín, F.J., Bravo, I.S., y Pérez,E.H. “Effect of Land Use on Adsorption and Fractionation of Copper in High Andean Andisols,” *Asian J. Chem.*, vol. Vol. 28, no.4, pp. 877–882, 2016.

P20. Producción de un abono orgánico líquido (Biol) a partir de residuos de Cosecha

Ximena Prieto, Edier Humberto Pérez, Claudia Ximena Martínez, Universidad del Cauca.

Resumen: Con este trabajo se pretende evaluar la evolución y calidad de abonos orgánicos líquidos (Biol) obtenidos de la planta de procesamiento de abono orgánico de la Federeación Campesina del Cauca, realizando el seguimiento de los procesos mediante control, análisis tradicional y calidad del producto final.

Palabras clave: biol, evolución, calidad.

Introducción: La agricultura orgánica pretende sostener y promover la salud del suelo, planta, animal, persona y planeta como una unidad indivisible, está presenta diversas alternativas con tecnologías de fácil manejo, rendidoras para el cultivo, económicas y armónicas con el ámbito agrícola; el uso de abonos orgánicos y como fuente de nutrimentos, se convierte en una opción amigable con el ambiente, asimismo redundaría en ahorros económicos. La utilización de abonos orgánicos desarrolla y expande el potencial productivo de los suelos, sin ocasionar daños al medio ambiente; estos se pueden producir con residuos de los cultivos, o excesos de cosecha.

Resultados: para los tratamientos analizados se presenta los siguientes resultados, el rango de pH es de 3.6 a 3.8, el porcentaje de nitrógeno es de 0,134 a 0,139 %, fósforo es de 127 a 259 mg/L, reportando mayor valor el tratamiento realizado con estiércol (259 mg/L), y el rango para potasio se encuentra de 210 a 349 mg/L.

Referencias: Cabrera, O., Díaz, A., Peña, J., Vera, J. Impacto de los biofertilizantes en la agricultura. Revista Mexicana de Ciencias Agrícolas Vol.3, 2012 p. 1261-1274. Norma Técnica Colombiana (NTC) 5167. Materiales Orgánicos. Utilizados como Fertilizantes o Acondicionadores de Suelos. Bogotá. 2004. RESTREPO RIVERA, J. Agricultura orgánica: principio objetivos y estrategias. *In* Material didáctico del X curso-taller latinoamericano sobre agricultura orgánica énfasis en la preparación de biofertilizantes y caldos minerales para café, frutales y hortalizas. (2000, San José, CR). Ed. J García. San José, CR. Universidad Estatal a Distancia. Mercedes de Montes de Oca. 135 p.

P22. Semisíntesis de derivados organometálicos de iridio (iii) a partir de un compuesto aril tetralin lignano.

Joan Sebastian Valencia Osorio, Clara Juliana Durango García, Universidad Antonio Nariño.

Resumen ejecutivo: El cáncer es una de las principales causas de muerte en los seres humanos a nivel mundial, llegando a 7.6 millones de fallecimientos en el 2008. Debido a esto la Organización Mundial de la Salud (OMS) proyectó que a nivel mundial las muertes a causa del cáncer continuaran aumentando, estimando que para el 2050 se presentaran 27 millones de casos nuevos de cáncer y aproximadamente 17.5 millones de muertes por esta terrible enfermedad.¹

Como respuesta a la crisis mundial que representa el cáncer, se plantea la obtención de nuevos posibles fármacos aplicables al tratamiento de esta enfermedad o en su diagnóstico temprano, lo cual se llevara a cabo a partir de la utilización de iridio para modificar productos naturales con actividad biológica conocidos extraídos de especies vegetales, dado que los metales pueden generar cambios importantes en el comportamiento de dichos productos naturales y sus efectos en los organismos vivos², permitiendo así obtener compuestos con características novedosas y singulares que hagan del posible fármaco una alternativa potente y viable por su actividad anticancerígena aumentada, ya sea citotóxica o antiproliferativa, y a su vez por presentar efectos secundarios reducidos, o en un caso dado podría presentar luminiscencia y una potencial aplicación en el diagnóstico temprano del cáncer. La formación de los compuestos se realizará mediante reacciones de acoplamiento en atmosfera inerte, para posteriormente purificar e identificar los productos obtenidos y sus características más relevantes utilizando técnicas espectroscopias como espectrometría infrarroja (FT-IR), resonancia magnética nuclear (RMN) ¹H y ¹³C en 1D y 2D, espectrometría de masas (EM) y difracción de rayos X (DRX).

Resumen: Se ha reportado que los complejos organometalicos de metabolitos secundarios presentan aumentos importantes en la actividad biologica respecto al ligando libre.² En el presente estudio se realizará el acoplamiento a iridio (III) al metabolito secundario acetilpodofilotoxina (AcP), un compuesto aril tetralin lignano que presentan actividad citotoxica, al igual que otros compuestos similares provenientes de la misma ruta metabolica, como lo es la podofilotoxina³. Se presume que mediante la formación de complejos organometalicos se obtendran compuestos que exhiban aumentos en la actividad citotoxica o antiproliferativa respecto al ligando libre, ademas de un aumento en la selectividad de la misma hacia las celulas cancerigenas. La reacciones de acoplamiento son realizadas en atmosfera inerte realizando seguimiento con cromatografia en capa fina (CCF) y posteriormente purificadas por cromatografia en columna abierta (CC) para finalmente ser caracterizadas mediante tecnicas espectroscopicas como FT-IR, RMN ¹H y ¹³C en 1D y 2D, EM y DRX. Los resultados obtenidos de FT-IR, RMN ¹H y ¹³C proponen la obtención de un compuesto (nombrado 11) producto del acoplamiento del iridio con AcP, en el que se dió la ruptura del grupo acetilo durante el acoplamiento, y formación de un complejo (nombrado F) en el cual el acoplamiento tuvo lugar mediante la interacción del iridio (III) con uno de los anillos aromaticos de la molecula junto con el grupo carbonilo del anillo lactonico caracteristico de AcP

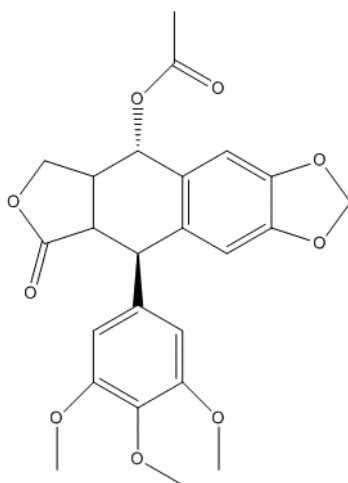


Fig. 1. Estructura de la acetilpodofiloxina (AcP).

Resultados:

Se aislaron y purificaron 2 compuestos procedentes de la reacción entre Iridio y AcP, nombrados 11 y F. los cuales fueron analizados por. Los resultados de FT-IR, RMN ^1H y ^{13}C obtenidos para 11 proponen la obtención de compuesto producto del acoplamiento del iridio con AcP, en el que se dió la ruptura del grupo acetilo (fig. 1) durante el acoplamiento, dando lugar a un compuesto cuadrado plano de $18 e^-$ que presenta unión entre el iridio y el oxígeno que une al grupo acetilo con el anillo central y la nube pi del anillo aromático próximo a la lactona, como se muestra en la fig. 2.

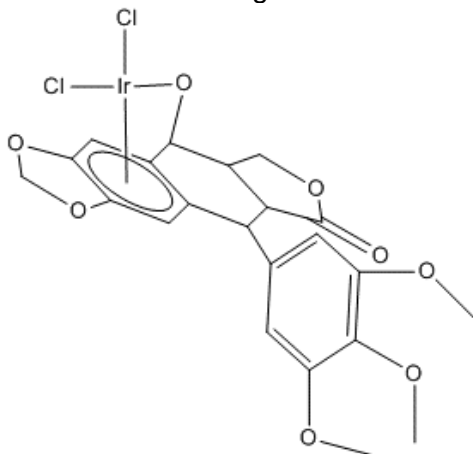


Fig. 2. Estructura propuesta para el compuesto 11.

Para F, los resultados nos permite establecer de forma la posible formación de un complejo Ir-AcP en el que el metal se encuentra unido al anillo aromático inferior y al grupo carbonilo de la lactona formando un complejo cuadrado plano de $18 e^-$. Lo anterior se establece basándose en los desplazamientos significativos en los espectros IR, principalmente bandas correspondientes a los átomos que componen la lactona y al anillo aromático al que se encuentra unido el iridio, dado que es un complejo rico. electrones, planteamos que posiblemente en la interacción metal-carbonilo sucede una retrodonación del metal hacia

los orbitales de antienlace del enlace C=O, causando que este se elongue, generando un desplazamiento batocromico importante en el espectro IR.

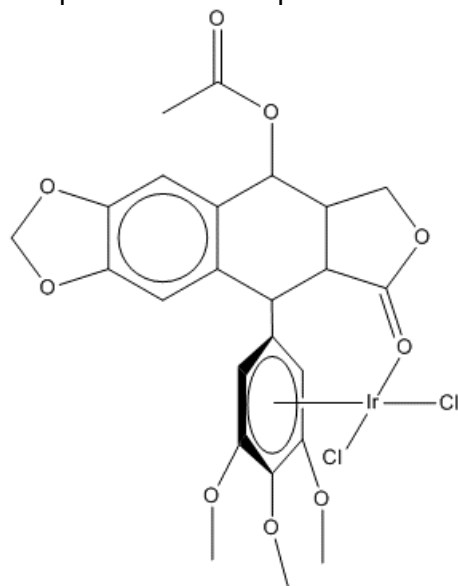


Fig. 3. Estructura propuesta para el compuesto F.

Referencias:

1. Senthikumar R., *et al.* Anticancer and multidrug-resistance reversing potential of traditional medicinal plants and their bioactive compounds in leukemia cell lines. *Chinese Journal of Natural Medicines*. 2014, 12 (12): 881-894.
2. Selvaraj S., Krishnaswamy S., Devashya V. Flavonoid – Metal Ion Complexes. *Medicinal Research Reviews*. 2014, 34 (7): 677-702.
3. Rojas A., Alvarez L., Antúnez M., *et al.* Aryldihydronaphtalene-type lignans from *Bursera fagaroides* var. *fagaroides* and their antimitotic mechanism of action. *RSC Advance*. 2016, 6 (12): 4950-4959.
4. Fabricant D., Farnsworth N. The value of plants used in traditional medicine for drug discovery. *Environmental Health Perspectives*. 2001, 109 (3): 69–75.

P23. Funcionalización de la podofilotoxina por quelación al centro metálico de iridio (III)

Andrés Darío Betancourth Uribe, Clara Juliana Durango, Universidad Antonio Nariño.

Resumen ejecutivo: los negativos pronósticos sobre el aumento de los casos de cáncer a nivel mundial dados por la OMS, han llevado a que el estudio y diseño de nuevos compuestos más selectivos y efectivos para el tratamiento del cáncer tomen especial interés. Actualmente, la complejación de metabolitos secundarios a centros metálicos, ha demostrado el mejoramiento de la selectividad y eficacia respecto al fitoquímico libre. En este sentido, el proyecto consiste en la síntesis de un complejo organometálico, en el cual, la podofilotoxina (un potente citotóxico) actuará como ligando en la formación de un compuesto estable con el metal iridio (III). Dicho compuesto será caracterizado por IR, RMN 1H y 13C y rayos X (en caso de obtener cristales). Los resultados obtenidos podrían dar nuevas perspectivas y avances sobre el diseño y la síntesis de compuestos inorgánicos a partir de metabolitos secundarios, que puedan tener importante actividad anticancerígena

Resumen: la funcionalización de metabolitos secundarios con actividad anticancerígena a través de la quelación a centros metálicos, ha representado una importante estrategia en la búsqueda del mejoramiento de la selectividad y eficacia de los fitoquímicos. La podofilotoxina es un polifenol altamente citotóxico, característica que ha sido controlada por la formación de derivados orgánicos. En la presente investigación, se planteó la quelación de dicho compuesto al centro metálico de iridio (III). De acuerdo a los análisis de IR y RMN 1H, se presume una interacción del metal con los grupos funcionales hidroxilo y aromáticos de la podofilotoxina para los dos compuestos obtenidos. Estos cambios estructurales generados sobre el metabolito podrían ser funcionales en la generación de un compuesto con actividad anticáncer. Palabras clave: complejo organometálico, metabolito secundario, podofilotoxina, iridio. Introducción: Según la OMS, el cáncer es una de las principales causas de mortalidad a nivel mundial (8,2 millones de muertes en 2012), y se pronostica además un aumento del 70% en nuevos casos en los próximos 20 años. Por esto, las investigaciones realizadas sobre cáncer se han enfocado principalmente hacia la búsqueda de nuevos medicamentos más selectivos y efectivos [1]. Las plantas medicinales han sido una fuente valiosa de agentes terapéuticos, y hoy en día medicinas son obtenidas de metabolitos secundarios de las plantas, entre ellos los polifenoles [2]. La (figura 1) es un polifenol que ha demostrado destacadas propiedades citotóxicas, y su derivado sintético (etopósido) es usado como medicamento en el tratamiento de la leucemia [3]. Además de la producción de derivados orgánicos, la quelación a centros metálicos ha representado otra estrategia efectiva en la búsqueda del mejoramiento de la actividad anticáncer de los polifenoles. Se han reportado flavonoides como naringenina, apigenina o luteolina coordinados a centros metálicos como Cu, Fe o Ni con mejor actividad anticáncer respecto al polifenol libre [4]. Los agentes antitumorales a partir de metales del grupo del platino (Ir, Os, Rh, Pt), han demostrado ventajas adicionales sobre moléculas orgánicas: sitios de coordinación adicionales, actividad REDOX, actividad terapéutica fotodinámica y sustituciones de ligandos [5]. En este sentido, se plantea la semisíntesis de nuevos compuestos organoiridio a partir de la reacción de la podofilotoxina con iridio (III), que permitan proporcionar una nueva perspectiva sobre las modificaciones químicas a dichos

compuestos, y así obtener nuevos avances que promuevan el desarrollo de agentes quimiopreventivos y quimioterapéuticos de cáncer.

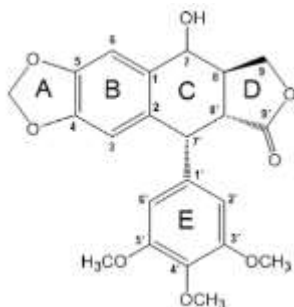


Figura 1. Estructura de la podofilotoxina

Resultados: La semisíntesis de los complejos organometálicos [Ir(Podo)] (Podo=podofilotoxina) se realizaron en atmósfera inerte por medio de la línea Schlenk. Los seguimientos a través de CCF permitieron destacar la formación de dos compuestos (A y B) que fueron estables al aire, separados a través de cromatografía en columna abierta cuyos puntos de fusión superaban los 300°C. Los análisis de IR del compuesto B, permitieron establecer una posible interacción del metal con el ligando a través del átomo de oxígeno desprotonado del grupo hidroxilo, ya que la vibración (OH) del ligando libre a 3480,47cm⁻¹ estaba ausente en el complejo. Al comparar las bandas vibracionales en la región aromática (1400-1600 cm⁻¹) se observaron desplazamientos, asumiendo una interacción con los anillos aromáticos de la estructura (figura 2). Los análisis sobre el espectro RMN 1H permitieron corroborar la posible interacción existente entre el metal y la nube electrónica π de los aromáticos y la unión al carbono 6' del ligando [6].

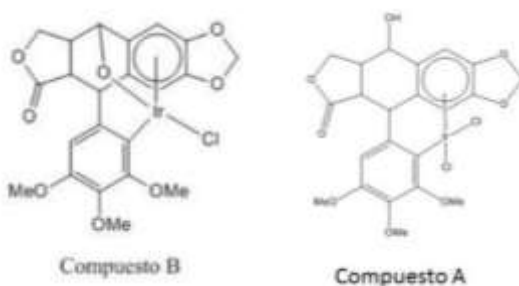


Figura 2. Estructura posible del complejo B y A. Los análisis realizados sobre el compuesto A, no evidenciaron una posible interacción con el grupo funcional hidroxilo (figura 2), pero si demostraron considerables cambios en los anillos aromáticos respecto al ligando libre, asumiendo una posible unión del metal a dichos grupos funcionales. Además de esto, (A) presentó luminiscencia a 254nm, característica que es reportada para complejos organometálicos de Iridio para (III) [5].

Referencias:

[1] Organización Mundial de la Salud, «OMS,» Febrero 2015. [En línea]. Disponible :

<http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs297/es/>. [Último acceso: 20 Enero 2016].
[2] Fantini M, Benvenuto M, Masuelli L, et al. In vitro and in vivo antitumoral effects of combinations of polyphenols, or polyphenols and anticancer drugs: Perspectives on cancer treatment. *Int J Mol Sci.*2015;16(5):9236-9282.

P24.

P25. Síntesis de un rotor molecular como celda fotovoltaica orgánica y su correlación estructural y óptica con los metalociclos respectivos de hierro y manganeso

Melissa Suarez Jimenez, Vanessa Vásquez Molina, Edwin Flórez, Yenny Patricia Ávila Torres, Universidad Tecnológica de Pereira

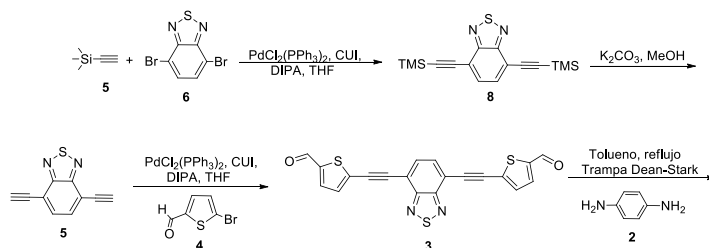
Resumen: El uso de celdas solares es una alternativa a las energías no renovables, las cuales pueden ser usadas en diversos ámbitos. El problema que exhibe hasta el momento esta tecnología, es el valor elevado de los materiales inorgánicos que se emplean en la actualidad para su elaboración y en algunos casos, puede resultar nocivos para el ambiente; por ello en los últimos años ha emergido un nuevo tipo de material para la fabricación de este tipo de dispositivos, las celdas solares orgánicas (OPV). Esta tecnología, se basa en la utilización de materiales moleculares orgánicos para la fabricación de dispositivos que exhiben una mayor flexibilidad a las de su contraparte inorgánica. En este sentido, en años recientes se ha buscado diseñar y sintetizar compuestos orgánicos que capten la energía solar y la conviertan en eléctrica con capacidad de competir con 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, materiales de silicio, germanio, arsénico y galio tienen hasta un 20% de eficiencia y los materiales orgánicos apenas llegan al 7%. En el presente proyecto de investigación, se plantea el diseño y síntesis de un rotor molecular mediante acoplamiento Sonogashira entre la molécula electrodonadora y la molécula electroattractora. Por medio de espectroscopia de ^{13}C y ^1H CPMAS RMN en estado sólido se obtendrá la información sobre la estructura del anillo central y los análisis ópticos se seguirán por medio de espectroscopia fotoelectrónica de rayos-X y reflectancia difusa en estado sólido. Posteriormente se sintetizará la contraparte inorgánica ensamblando los iones metálicos de hierro y manganeso al rotor molecular orgánico y se llevará a cabo un seguimiento por análisis elemental, espectrometría de masas y difracción de rayos-X en caso de obtener compuestos monocristalinos.

Palabras clave: Aceptor de electrones, celda solar, donador de electrones, energía, OPV.

Introducción: El crecimiento energéticamente insostenible y los efectos del cambio climático son problemáticas actuales que han llamado la atención mundial en todos los niveles, las estimaciones en los próximos diez o veinte años indican que el futuro inmediato de los mercados energéticos a nivel mundial continuará siendo dominado por los combustibles fósiles, los cuales son fuentes energéticas no renovables y altamente contaminantes. El petróleo representa actualmente el 35% del consumo mundial de energía primaria; seguido por el carbón, el 29%; y el gas, el 24%, la energía hidroeléctrica y la energía nuclear en conjunto representan el 12%; y finalmente la energía renovable, con menos del 1%. La mayoría de las previsiones indican que el consumo energético global no será muy diferente en 2030, sin embargo, se espera que las participaciones de las energías renovables superen el 5%. En la actualidad la industria fotovoltaica como fuente de energía

renovable ha experimentado un rápido crecimiento a nivel mundial, los componentes claves que han impulsado la viabilidad económica de la energía solar ha sido su alta eficiencia, alta productividad de fabricación y costos bajos de materiales. La generación de electricidad mediante energía solar fotovoltaica requiere la utilización de grandes superficies colectoras y por tanto de una cantidad considerable de materiales para su construcción. La fabricación de un panel solar requiere la utilización de materiales como aluminio (para los marcos), vidrio (como encapsulante), acero (para estructuras) los cuales son reutilizables y principalmente silicio policristalino, el cual es un material prometedor debido a su aceptable relación costo-eficiencia. Sin embargo, el silicio policristalino puede contener altas concentraciones de impurezas limitando el rendimiento de la celda solar. Para producir estas celdas inorgánicas se requiere control en la cantidad de partículas del aire, temperatura, humedad, flujo de aire, presión interior del aire, iluminación, etc. Estos cuartos limpios pertenecen a una tecnología muy costosa que pocas instituciones pueden tener y sobre todo a gran escala como lo son las fábricas. Por el contrario, para producir las celdas OPVs (Celdas solares fotovoltaicas orgánicas) no se requiere tener un control estricto de los parámetros antes mencionados y pueden fabricarse en laboratorios con equipos mucho más económicos sin necesidad de cuartos limpios. En este panorama general de la problemática actual de la industria energética, la familia de 1,4-bis(triarylpropinil)benceno ofrece una alternativa en la construcción de nuevos OPVs. Su sistema π conjugado presenta una frecuencia tal que absorbe a longitudes de onda entre 400 y 700 nm. Propiedad indispensable para su uso como celda solar.

Resultados: síntesis realizada:



Se partió del compuesto 4, el cual presentaba muchas impurezas y estaba fraccionado en diferentes porciones, esto se verificó al realizar CCD con fase móvil hexano: acetato de etilo 8:2 y revelado con UV.

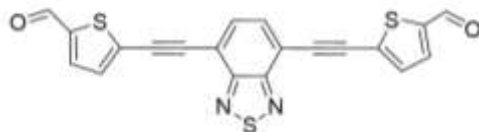


Figura 1. Compuesto de partida 4

Se realizaron varios procedimientos como cromatografía en columna, cromatografía en columna fase reversa, columna preparativa y separación líquido-líquido para purificarlo, y se observó que el único método que tuvo un resultado efectivo fue la separación líquido-líquido con una fase de diclorometano y la otra fase metanol: agua 1:1 (figura 6), esto se verificó por CCD con fase móvil hexano: acetato de etilo 8:2 y revelado con UV.



Figura 2. Separación líquido -líquido compuesto de partida

Posteriormente se procedió a la caracterización del compuesto purificado (fase diclorometano) por espectroscopia IR (Figura 8, Tabla 1) y UV (Figura 9, Tabla 2)

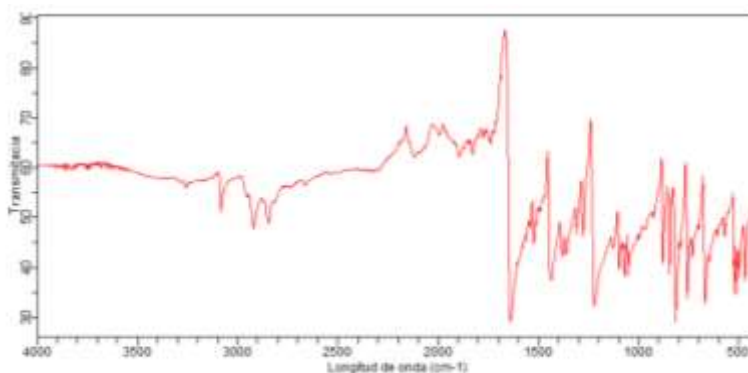


Figura 3. Espectro IR del compuesto de partida purificado

Tabla 1. Bandas de absorción espectro IR del compuesto de partida purificado

Banda absorción cm^{-1}	Asignación de banda	Banda absorción cm^{-1}	Asignación de banda
3436,822	= C – H st	1495,756	C = N st
3309,863		1465,398	C – S st
3146,336	= C – H st	1413,417	
2993,528	-C-H st	1325,25	C=C conjugación intensa
2993,528		1297,853	
2926,418		1255,676	
2756,677		1137,823	
2439,233		1095,125	
2249,648	C = C st	1064,12	N – S st
2041,164		1035,703	
1977,971	C = O st	982,029	
1897,902		900,738	

1802,248		809,331	= C – H flexión
1613,738	C = C st	753,779	
1541,802	C = N st	712,763	C-S-C st

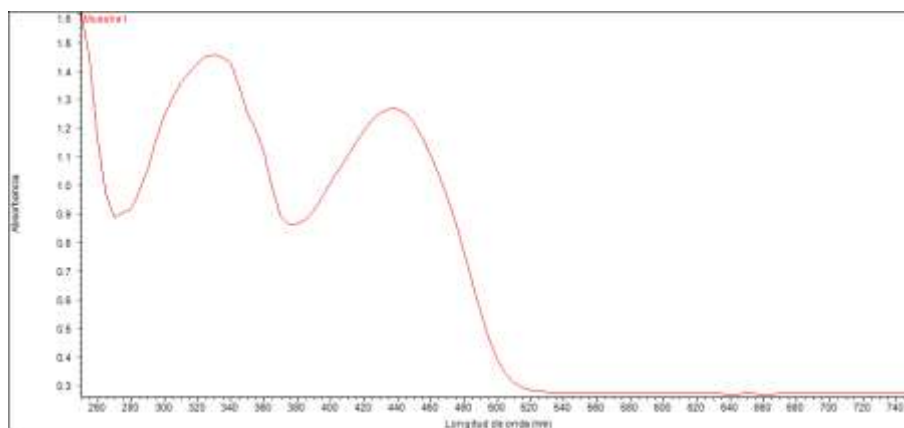


Figura 4. Espectro UV del compuesto de partida purificado

Referencias:

1. Goodsell, D.S. *The Machinery of Life*. Springer Science, New York, 2nd Ed. **2009**.
2. a) Mislow, K. *Chemtracts Org. Chem.* **1988**, 2, 151–174. b) Kelly T. R. *Molecular machines. Topics in Current Chemistry*. Springer, Heidelberg, **2005**, Vol 262.
3. a) Fletcher, S.P.; Dumur, F.; Pollard, M.M.; Feringa, B.L. *Science* **2005**, 310, 80–82. b) Hawthorne, M.F. *Science* 2004, 303, 1849–1851.
4. Leigh, D.A.; Wong, J. K.Y.; Dehez, F.; Zerbetto, F. *Nature*, **2003**, 424, 174–179.
5. Browne, W. R.; Feringa, B. L. (2006) *Nat. Nanotechnol* **2006**, 1, 25–35. b) Kottas, G, S.; Clarke, L. I.; Horinek, D.; Michl, J. (2005) *Chem. Rev.* **2005**, 105,1281–1376.
6. a) Karlen, S. D.; Reyes, H.; Taylor, R. E.; Khan, S. I.; Hawthorne, M. F.; Garcia-Garibay, M. A. *PNAS* **2010**, 107, 34, 14973-14977. b) Rodríguez-Molina, B.; Pozos, A.; Cruz, R.; Romero, M.; Flores, B.; Farfán, N.; Santillan, R.; Garcia-Garibay, M. A. *Org. Biomol. Chem.* **2010**, 8, 2993-3000 c) Arcos-Ramos, R.; Rodríguez-Molina, B.; Romero, M.; Méndez-Stivalet, J.M.; Ochoa, M.E.; Ramírez-Montes, P.I.; Santillan, R.; Garcia-Garibay, M.A.; Farfan, N. *J. Org. Chem.*, **2012**, 77, 6887–6894. d) Czajkowska-Szczykowska, D.; Rodríguez-Molina, B.; Magaña-Vergara, N.E.; Santillan, R.; Morzycki, J.W.; Garcia-Garibay, M. A. *J. Org. Chem.*, **2012**, 77, 9970–9978. e) B. Rodríguez-Molina, N. Farfán, M. Romero, J. M. Méndez-Stivalet, R. Santillan, M. A. Garcia-Garibay. *J. Amer. Chem. Soc.* **2011**, 133, 7280–7283

P26. Síntesis de ligantes imino- aminoéster y su coordinación a cromo(III) como modelos estructurales de FTG

John Guateque- Londoño, Gustavo Rojas- Olave, Edwin Florez- Lopez, Yenny Ávila-Torres, Universidad Tecnológica de Pereira

Resumen

Con la finalidad de sintetizar modelos estructurales biomiméticos de Factor Tolerante a la Glucosa, en este artículo se reporta la síntesis de un compuesto iminoéster (**3**) a partir de bencilamina (**1**) y acetoacetato de etilo (**2**) en metanol anhidro. Por otro lado, la reducción a un aminoéster (**4**) y la caracterización espectroscópica IR, ^1H ^{13}C RMN y GC-MS de los ligantes respectivos. Finalmente se proponen dos estructuras producto de la coordinación al centro metálico cromo(III) a partir de la caracterización espectroscópica en UV-Vis e IR.

Palabras clave: FTG, cromo(III), iminoéster, aminoalcohol.

Introducción: El estudio de compuestos de coordinación del ion metálico Cromo(III) se hizo importante luego de que se descubriera que estas especies hacen parte de un agente metabólico denominado factor tolerante a la glucosa FTG, reportado por Mertz y Schwarz en 1955 [1]. En este sentido, la relevancia del descubrimiento está en el hecho de que la bioquímica del Cromo(III) ejerce un rol importante en el control del metabolismo de carbohidratos y lípidos en el organismo[2][3]. Este proceso es mediado por uno o más compuestos de coordinación del ion metálico con aminoácidos como aspartato, glutamato, glicina y cisteína para el caso de la cromodulina [4][5]. La estructura de difracción de rayos-X no ha sido reportada para FTG, sin embargo se propone que la esfera de coordinación está formada por cromo (III) coordinado a ácido nicotínico y aminoácidos como cisteína de residuos peptídicos glutatiónicos[4], [6]. El estudio de la bioquímica de vanadio y zinc ha demostrado su participación en el metabolismo de carbohidratos y lípidos, al igual que el cromo [5], [7]. El vanadio empezó a ser usado en 1899 como un fármaco oral en forma de metavanadato sódico para pacientes diabéticos, reportando actividad [7]. Actualmente, la investigación con vanadio avanza sobre el diseño de compuestos de coordinación del ion vanadilo con moléculas orgánicas que mejoran la bioabsorción respecto al uso de sales inorgánicas. La eficacia de estos compuestos ha sido evaluada *in vivo* en ratones [7]. La investigación de nuevas moléculas que funcionen como fármacos en el tratamiento de la diabetes mellitus (I y II) y sus complicaciones asociadas también se ha orientado sobre compuestos orgánicos. La aminoguanidina se ha estudiado como compuesto capaz de prevenir disfunciones vasculares producto de la diabetes[8]. La metformina actualmente es usada como medicamento en el tratamiento de efectos colaterales de la diabetes como lo son: obesidad, hipertensión, entre otras. Además se usa también como fármaco en el tratamiento de la diabetes mellitus tipo 2 debido a que la metformina no afecta directamente los niveles de insulina sino que regula los niveles de carbohidratos en el torrente sanguíneo [9], [10]. Se han usado compuestos derivados de arilsulfonas en el tratamiento de la obesidad generada por DM [11]. A continuación se presenta la reacción de aminación reductiva usando borohidruro de sodio como agente reductor, con seguimiento por TLC y caracterización por espectroscopia IR, RMN ^1H y ^{13}C .

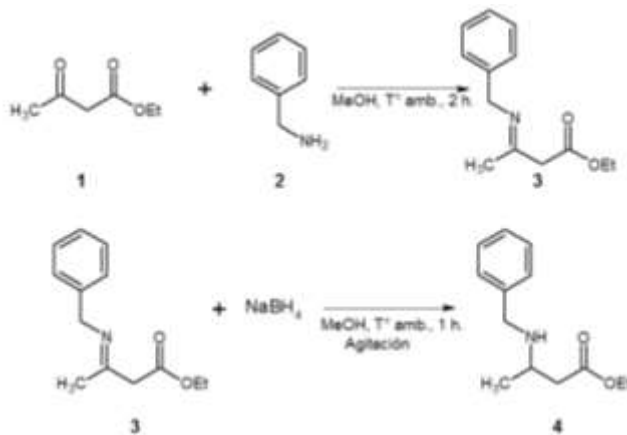


Figura 1. Esquema de síntesis de aminoester.

Resultados:

Iminoester 3. El producto (3) esperado es una ceto-imina donde se puede presentar un tautomerismo debido a los hidrógenos ácidos del metileno que se encuentra en el carbono α con respecto al carbonilo de ester, generando así el enol-imina o la ceto-enamina, pero el tautomero enol-imina prevalece sobre el ceto-enamina, debido a que el oxígeno es más electronegativo por ende tiene mayor facilidad de extraer dicho protón del metileno[13][14]. El espectro IR confirma este planteamiento donde se observa en 3357 cm^{-1} una vibración de tensión para el enlace O-H libre, mientras que en 1660 cm^{-1} se encuentra la vibración de tensión C=N, estableciendo así la presencia del grupo imino y no del grupo carbonilo, porque de presentarse este grupo la vibración característica aparecería sobre 1700 cm^{-1} .

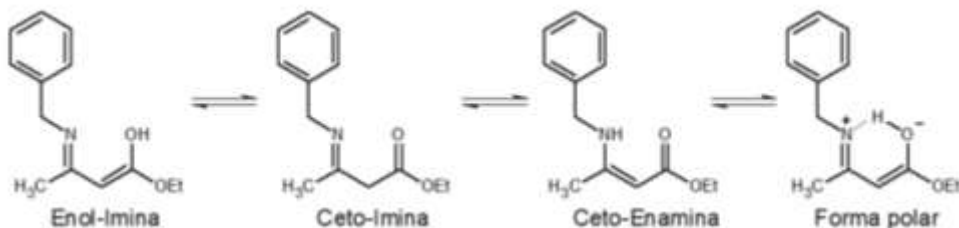


Figura 2. Tautomerismo Ceto-imina

Tabla 1. Señales espectro RMN ^1H de iminoester 3.

Tipo de señal	Desplazamiento (ppm)
Singlete (A)	1,92
Singlete (B)	3,64
Triplete (C)	1,22-1,30
Cuartete (D)	4,07-4,15
Multiplete (E)	7,25-7,38
Singlete (F)	4,55

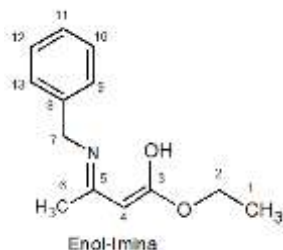


Figura 3. Asignación de carbonos del producto de síntesis.

Tabla 2. Señales características de ^{13}C RMN para *bencilamina*, *acetoaceto de etilo*, *compuesto (3)* y *compuesto (4)*.

Compuesto	Desplazamiento ^{13}C (ppm)				
	C3	C4	C5	C6	C7
Bencilamina	-	-	-	-	46.41
Acetoacetato de etilo	172.22	50.11	89.79	21.12	-
Compuesto (3)	170.53	83.18	161.78	19.46	46.38
Compuesto (4)	172.31	51.57	60.30	20.42	49.70

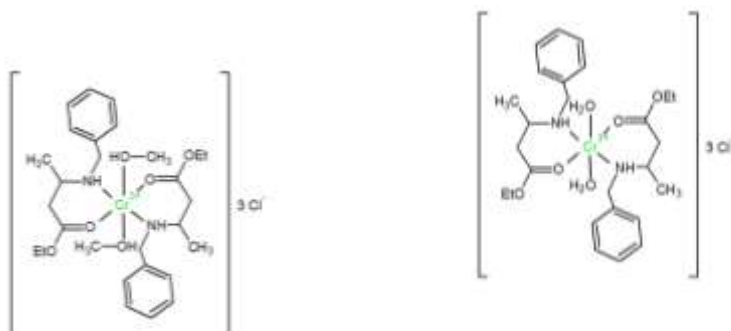


Figura 5. Propuesta estructural de los compuestos de coordinación, en metanol (izquierda) y en agua (derecha).

Referencias: (1). J.B. Vincent, " The bioinorganic of chrom (IImil) vol 20. No. 68 pp 1-26, 2001. (2) Y. Chen, H.M. Watson, J.Geo, S.H. Sinha, C.J. Cassady, J.B. Vincent. "The Characterization of the Organic Component of Substance and Its Binding of Chromium 1 – 3," no. 2, pp. 1225–1232, 2011. (3) S. Sharma, R. P. Agrawal, M. Choudhary, S. Jain, S. Goyal, and V. Agarwal, "Beneficial effect of chromium supplementation on glucose, HbA1C and lipid variables in individuals with newly onset type-2 diabetes.," *J. Trace Elem. Med. Biol.*, vol. 25, no. 3, pp. 149–53, Jul. 2011.

**P27. Actividad oxidante del compuesto trinuclear de cobre
[Cu₃(R,R-CPSE)₃(H₂O)₃].8H₂O como modelo funcional del centro activo de la
metaloenzima Ascorbato oxidasa frente al ácido L-ascorbico**

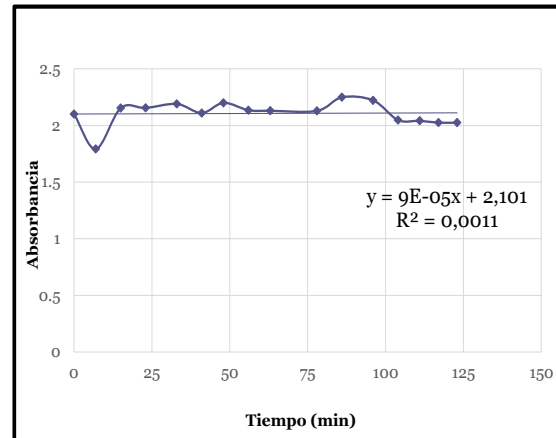
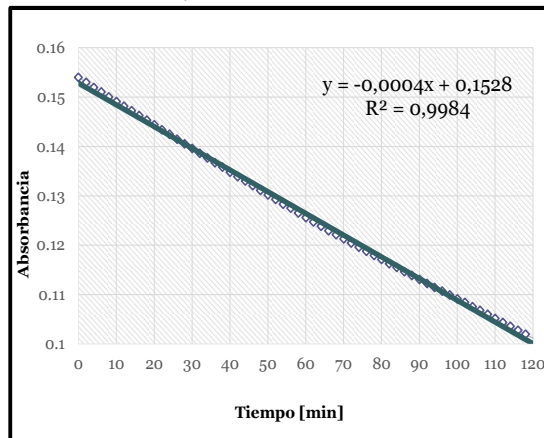
Didier Jair Gómez Cifuentes, Yenny Patricia Avila, Universidad Tecnológica de Pereira

Resumen: Los compuestos de coordinación están siendo estudiados a lo largo de los últimos años, presentando grandes avances en campos como la metalurgia, análisis químicos y en el campo de la biología. En este último, los compuestos de coordinación han permitido el avance en la síntesis de modelos biomiméticos funcionales o estructurales de los sitios activos de metaloenzimas. Los metales de transición como hierro, zinc y cobre a menudo son componentes claves de los sitios activos de las enzimas. En el caso concreto del cobre es posible encontrarlo en metaloenzimas producidas tanto por animales como plantas cumpliendo diferentes funciones, tales como: transferencia de electrones (azurina, plastocianina), reacciones de oxigenación (ascorbato oxidasa), transporte de oxígeno (hemocianina). (Ballesteros, 2013). Como modelos estructurales de ascorbato oxidasa se sintetizó en 2013 un compuesto trinuclear de cobre (II). Este se llevó a cabo a partir de una síntesis asincrónica simultánea. Esto implica la desprotonación del grupo alcohol del sistema mononuclear de cobre(II) con el ligante N-acetil R,R(H₂cpse) y la activación asociativa del mismo sobre la sal metálica de acetato de cobre. (Avila- Torres, 2013). Fueron evaluadas las propiedades magnéticas en el reporte previo, pero no la actividad biológica y su potencial aplicación como modelo funcional. En este contexto, el presente proyecto de investigación tuvo como objetivo evaluar la catálisis por parte del compuesto trinuclear de cobre, estableciendo patrones de concentración de 1*10⁻³ M de ácido ascórbico y 4,84*10⁻⁴ de [Cu₃(R,R-CPSE)₃(H₂O)₃].8H₂O, realizando seguimientos en espectrofotometría UV-visible y espectroscopia Infrarroja.

Palabras clave: Compuesto trinuclear de cobre, ascorbato oxidasa, catálisis, metaloenzimas.

Introducción: Una gran variedad de metaloenzimas que contienen cobre son producidas en las plantas y animales, se utilizan para la transferencia de electrones, reacciones de oxigenación y transporte de oxígeno. La enzima ascorbato oxidasa que es de interés en el presente trabajo es quien realiza trabajos como reacciones de oxigenación. La enzima ascorbato oxidasa es el catalizador del ácido ascórbico (AA), permitiendo su degradación a ácido dehidroascorbico (DHA), el ascorbato presenta gran importancia a nivel celular cumpliendo funciones de protección frente a radicales libre y el estrés oxidativo. La química Bioinorgánica se ha preocupado por sintetizar modelos biomiméticos que permitan emular los centros activos de las metaloenzimas. El compuesto trinuclear de cobre [Cu₃(R,R-CPSE)₃(H₂O)₃].8H₂O posee una relación estructural con el centro activo de la enzima ascorbato oxidasa por tanto se estudiará la funcionalidad de dicho compuesto frente al ácido ascórbico.

Resultados: Estabilidad con la temperatura de AA, la degradación de AA es susceptible a la temperatura. Se ha reportado en trabajos previos cinética de primer orden para la degradación en diferentes sistemas como pulpa de mango y uchuva entre otros, (Gutiérrez, Hoyos, and Páez 2007). En el ensayo realizado en este proyecto, se llevó a cabo la cinética a 10°C y TA, observando que a 10°C el proceso min.de degradación presenta una cinética de primer orden y el sistema adquiere estabilidad a 120 min.



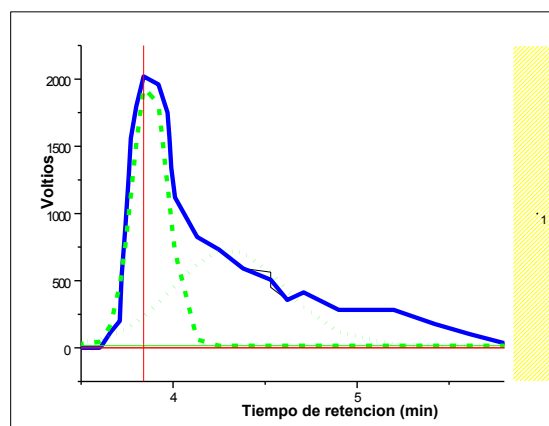
Cinética Ácido ascórbico a Temperatura ambiente

Cinética Ácido ascórbico a 10 °C.

Estabilidad con el pH.

El pH es una variable que se debe de controlar ya que el AA presenta tautomerismo. A pH básico la forma ionizada es más inestable que la estructura no ionizada. En caso de obtener un pH alto el dianión es la especie más inestable de AA. A continuación se muestra el espectro IR correspondiente a la estabilidad del AA a tres pH diferentes: ácido (presencia de ácido ortofosfórico, pH=3.0), base (presencia de bicarbonato de sodio, pH=8.0), neutro (presencia de buffer fosfato, pH=6.8). Adicional a este efecto, se variaron las relaciones estequiométricas (AA: Medio) con la finalidad de apreciar cualitativamente el efecto de la concentración sobre el desplazamiento en los respectivos equilibrios.

Se realiza la deconvolución de la envolvente de los perfiles cromatográficos a 265 nm y 220. Para establecer el efecto de TC en AA, se prepararon cinco soluciones de TC 0.1, 0.2, 0.3, 0.4 y 0.5 mL (500 ppm) y se adicionaron 176 ppm de AA a cada una de estas, aforando a 5 mL con etanol en medio ácido. Posteriormente se inyectaron 20µL de cada una de las mezclas al cromatógrafo líquido de alta eficiencia, adaptando la metodología de Shimada Yoshihiro y colaboradores, usando como fase móvil buffer fosfato. Se realizó el seguimiento a las longitudes de onda establecidas (220 y 265 nm).



El seguimiento a 265 nm muestra una disminución en la señal del detector alrededor de 3.2 min a medida que aumenta la proporción de trinuclear con respecto a AA. Las tablas con respecto a la integración del pico de mayor contribución, muestran el porcentaje de oxidación o conversión de AA a DHA estimado que aumenta de forma progresiva con el aumento del TC. En una relación 1:1 (TC:AA) el % inicial de disminución de área es sólo el 11.12 %. Sin embargo, en la proporción (5:1) es considerable la disminución de área en un 75 %. Adicionalmente, en el perfil cromatográfico a 220 nm, a medida que la proporción TC: AA aumenta, se favorece la formación de dos picos cromatográficos bien definidos, el primero con un tiempo de retención de 3.2 min asociado a DHA y otro a 4.5 min asociado posiblemente a MDA. Cabe resaltar, que este método cromatográfico fue una adaptación del reporte literario (Yoshihiro and Sanae 2008), por ende no se encuentran definidos los tiempos de retención de AA, DHA y DHA. Así mismo, el patrón que se utilizaría como blanco producto de la reacción de oxidación con H_2O_2 generó inestabilidad en el equipo de HPLC.

Referencias:(1) Ávila-Torres, Yenny et al. 2013. "Structure and Magnetic Properties of copper(II) and cobalt(II) Coordination Compounds Derived from Optically Active Tridentate Ligands." *Polyhedron* 51(1):298–306. (2) Casella, Luigi et al. 1999. "Inhibitor Binding Studies on Ascorbate Oxidase." 186:619–28. Smirnoff, Nicholas. 2000. "Ascorbic Acid: Metabolism and Functions of a Multi-Faceted Molecule." *Current Opinion in Plant Biology* 229–35. (3) Yoshihiro, Shimada and Ko Sanae. 2008. "Ascorbic Acid and Ascorbic Acid Oxidase in Vegetables ." *Chugojugaken Journal* 7:7–10. (5) Casella, Luigi et al. 1999. "Inhibitor Binding Studies on Ascorbate Oxidase." 186:619–28.

P28. Recuperación de hidrocarburos a partir de residuos de polietileno de baja densidad

Yeraldine Serna, Yenny Avila, Universidad Tecnológica de Pereira

Resumen La acumulación de polietileno de baja densidad constituye un problema que busca prontas y efectivas soluciones. En este sentido, el presente artículo de investigación plantea una alternativa al uso de estos residuos poliméricos. El proceso de pirólisis, permite la degradación a combustibles comerciales con ventajas considerables; es el caso de hidrocarburos con menor cantidad de azufre. Se reporta la caracterización de los productos de recuperación de una mezcla de polietileno de baja y alta densidad. Los productos obtenidos fueron comparados con parámetros comerciales para gasolina regular, gasolina extra, nafta virgen y alquilato de alto octano; encontrando que las fracciones presentan una mezcla de gasolina regular y gasolina extra en su mayoría, para intervalos de temperatura entre 120 °C y 320 °C. Así mismo, se diseñó y construyó un reactor de pirólisis con las siguientes condiciones: sistema de vacío, una bomba rotativa de dos etapas, uso de lecho fluidizado de materia prima, separación de los productos a través del condensador removiendo los subproductos, sistema de liberación de presión y desprendimiento lateral.

Palabras clave: pirólisis, hidrocarburos, plásticos.

Introducción: El proceso termoquímico mediante el cual un material orgánico de los subproductos sólidos se descompone por la acción del calor, en una atmósfera deficiente de oxígeno y se transforma en una mezcla líquida de hidrocarburos, gases combustibles, residuos secos de carbón y agua es denominado pirolisis (Agro Waste, 2004). Esta herramienta permite hoy en día reutilizar polietileno de baja- alta densidad y poliestireno de alto- bajo impacto degradando los materiales plásticos, mediante calor o con catalizadores; hasta el rompimiento de las macromoléculas a moléculas sencillas comúnmente llamadas monómeros (Duffo, 2011). A partir de estos monómeros, se podrían conseguir otros tipos de plásticos o combustibles según la técnica utilizada. En el proceso de pirolisis no se produce dioxinas ni furanos lo cual representa una ventaja (Ract, 2006). La temperatura, presión y transferencia de calor son variables a considerar, ya que la residencia del vapor en la zona de reacción induce varios intermediarios (Marcilla, Beltran, & Conesa, 2001). En un régimen isoterma la uniformidad de la temperatura involucra tiempo de contacto de los productos primarios de pirolisis, minimizando las reacciones secundarias de los productos primarios de la pirolisis y ofreciendo como consecuencia una mayor uniformidad del producto (Masuda et al., 2001). Sin embargo, la heterogeneidad de los productos es significativa dado que los plásticos procedentes de uso doméstico ofrece un 57% de poliolefinas, 14% de policloruro de vinilo (PVC), 19% de poliestireno, 5% de otros plásticos o papel, junto con un 5% de materiales inorgánicos tales como la arena y sales (Arturo, Lucía, & Varela, 2006). El diseño de nuevos reactores en la actualidad está dirigido a la actividad en intervalos de temperatura variable, incremento del rendimiento de ceras (parafinas C12 - C50) como materia prima de las unidades comerciales de craqueo catalítico o de las unidades de craqueo con vapor y minimización del consumo energético de la pirolisis (Al-Salem, Lettieri, & Baeyens, 2009), (Buekens & Huang, 1998), (MacDiarmid, 2001), (Naik, Goud, Rout, & Dalai, 2010), (Faravelli et al., 1999).

En este sentido, el presente proyecto se plantea una alternativa al uso de estos residuos poliméricos. El polietileno es difícilmente biodegradable y se convierte en un producto altamente contaminante. El relleno sanitario no es una opción adecuada para eliminar desechos plásticos debido a su lenta tasa de degradación y en el caso del uso de incineradores hay generación de contaminantes significativos al aire. La escisión pirolítica permite la reutilización de estos residuos, pero esto implica controlar dos variables esenciales para el diseño de un reactor tales como, la conductividad térmica y la viscosidad de los plásticos. Así mismo, el uso apropiado de sistemas de reactores discontinuos o semidiscontinuos utilizando condiciones de lote /semi lote, lecho fijo, fluidizado, cama, cama arrojada, microondas y horno de tornillo. Se plantea la degradación de residuos termoplásticos, utilizando un reactor convencional de vidrio pyrex y variaciones en la estequiometría del catalizador comercial bentonita. El hecho de mejorar las características del catalizador conlleva a optimizar económicamente el proceso de reciclado. Finalmente se reporta la naturaleza de combustibles obtenidos, los cuales presentan calores de combustión en el intervalo reportado para gasolina regular.

Resultados: Los productos obtenidos fueron comparados con parámetros comerciales para gasolina regular, gasolina extra, nafta virgen y alquilato de alto octano; encontrando que las fracciones presentan una mezcla de gasolina regular y gasolina extra en su mayoría, para intervalos de temperatura entre 120 °C y 320 °C. Finalmente, el porcentaje de azufre en todos los casos es inferior al valor comercial reportado para gasolina regular, lo cual se espera porque estos residuos ya han sido sometidos a un proceso de polimerización inicial y no son producto directo del sistema petroquímico, lo cual representa una ventaja para esta mezcla de hidrocarburos obtenida. Así mismo, se diseñó y construyó un reactor de pirolizado con las siguientes condiciones: sistema de vacío, una bomba rotativa de dos etapas, uso de lecho fluidizado de materia prima, separación de los productos a través del condensador removiendo los subproductos, sistema de liberación de presión y desprendimiento lateral.

Referencias: (1) Agro Waste. (2004). Pirolisis. *Pirolisis*, 1–4, [2] Al-Salem, S. M., Lettieri, P., & Baeyens, J. (2009). Recycling and recovery routes of plastic solid waste (PSW): A review. *Waste Management*, 29(10), 2625–2643. <http://doi.org/10.1016/j.wasman.2009.06.004>, Buekens, A. G., & Huang, H. (1998). Catalytic plastics cracking for recovery of gasoline-range hydrocarbons from municipal plastic wastes. *Resources, Conservation and Recycling*, 23(3), 163–181. [http://doi.org/10.1016/S0921-3449\(98\)00025-1](http://doi.org/10.1016/S0921-3449(98)00025-1).

P 29. Síntesis y caracterización de β -aminoalcoholes derivados de aminas benciladas, anilinas y compuestos carbonílicos, como precursores en compuestos de coordinación.

Luis Fernando Mosquera Aguilar, Andrés Felipe torres peña, Edwin Flórez López,
Universidad Santiago de Cali

Resumen ejecutivo: Se diseñara y desarrollara una metodología sintética viable para la síntesis y caracterización de una serie de especies orgánicas polifuncionales de compuestos 1,3-dicarbonílicos (2,4-pentanodiona y acetoacetato de etilo) y derivados de bencilaminas y anilinas.

Resumen: En el presente proyecto de investigación se pretende realizar la síntesis de una serie de ligandos polifuncionales a partir de reacciones de aminación reductiva y reducciones clásicas empleadas en síntesis orgánica, para posteriormente emplearlos como ligandos en compuestos de coordinación. Las reacciones se llevarán a cabo entre compuestos 1, 3-dicarbonílicos (2,4-pentanodiona y acetoacetato de etilo) y derivados de bencilaminas y anilinas. Una vez obtenidos los compuestos de interés, se hará su respectiva purificación y elucidación de la estructura de los mismos mediante el empleo de técnicas espectroscópicas como resonancia magnética nuclear (RMN ^1H y ^{13}C) y espectroscopia infrarroja (IR).

Palabras clave: síntesis, caracterización, compuestos polifuncionales.

Introducción: La síntesis de compuestos orgánicos polifuncionales como los β -aminoésteres y β -aminoalcoholes constituye uno de los mayores objetos de investigación dentro del campo científico e industrial ^[1]. Estas especies hacen parte de una gran variedad de sustancias bioactivas como lo son los aminoácidos, lignanos, monoterpenos y entre otros productos naturales, por lo que juegan un papel fundamental en un elevado número de procesos fisiológicos ^[2]. Estos compuestos han sido catalogados como estructuras químicas de gran importancia debido a sus propiedades y diversas aplicaciones, entre las cuales se encuentra su uso como intermediarios en química orgánica para la obtención de productos naturales y sintéticos biológicamente activos, productos farmacéuticos, péptido miméticos y pesticidas ^[3]. Además, estas especies químicas han sido empleadas en química inorgánica como agentes quelantes para su coordinación a centros metálicos ^[4].

La gran variedad de aplicaciones que presentan estas especies, refleja un número igualmente variado de procesos o rutas sintéticas utilizadas que permiten la preparación de los mismos ^[5]. Pese a esto, algunos procesos de síntesis son complejos y de alto costo económico ^[6]. Con lo cual se pone de manifiesto el diseño nuevas rutas sintéticas que no presenten estas desventajas. Por lo anterior, el objetivo del presente trabajo consiste en diseñar y desarrollar una ruta sintética viable y óptima para la obtención de dichas moléculas orgánicas.

Metodología: El desarrollo experimental para la obtención de las especies químicas de interés constará de tres etapas fundamentales, las cuales a su vez están constituidas por diversos pasos o procesos que permitirán el cumplimiento de los objetivos planteados. La primera etapa consistirá en realizar la síntesis de seis β -aminoésteres (3a-3c y 7a-7c) mediante la reacción a reflujo de las materias prima, es decir, aminas benciladas (1), anilinas (5) y los compuestos 1,3-dicarbonílicos (2 y 6). La segunda etapa constará de purificar y elucidar los β -aminoésteres sintetizados previamente, para ello se dispondrá de extracciones con solventes activos y de técnicas espectroscópicas como IR, RMN ^1H y ^{13}C , respectivamente. Por último, se sintetizarán y caracterizarán los β -aminoalcoholes (4a-4c y 8a-8c) correspondientes a la reducción con hidruro de litio y aluminio de los β -aminoésteres de partida.

En las *figuras 1 y 2*, se pueden apreciar las reacciones que se llevarán a cabo para la obtención de los compuestos de interés.

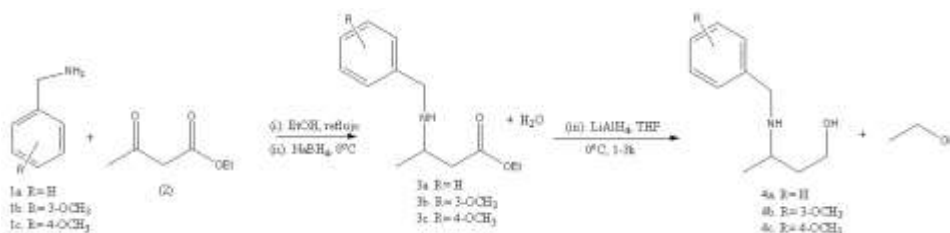


Fig. 1. Metodología propuesta para la síntesis de los aminoésteres y aminoalcoholes derivados de aminas benciladas y el acetoacetato de etilo.

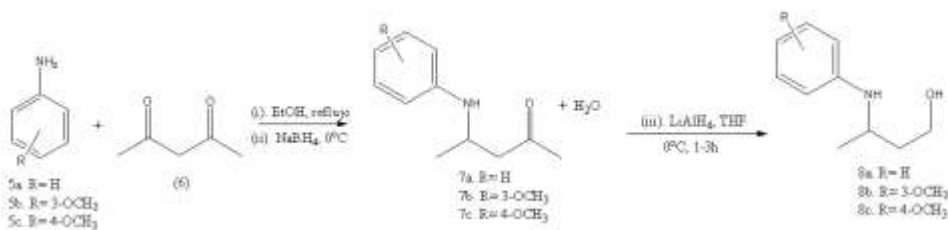


Fig. 2. Esquema de la síntesis de aminoésteres y aminoalcoholes derivados de anilinas y la 2,4-pentanonodiona.

Referencias:

- (1) Reddy, B. M.; Patil, M. K.; Reddy, B. T.; Park, S. E. *Catal. Commun.* **2008**, 9 (5), 950–954. (2) Hosoya, Y.; Kameyama, T.; Naganawa, H.; Okami, Y.; Takeuchi, T. *J. Antibiot. (Tokyo)*. **1993**, 46 (8), 1300–1302. (3) Magrioti, V.; Hadjipavlou-Litina, D.; Constantinou-Kokotou, V. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2003**, 13 (3), 375–377. (4) Accadbled, F.; Tinant, B.; Hénon, E.; Carrez, D.; Croisy, A.; Bouquillon, S. *Dalton Trans.* **2010**, 39 (38), 8982–8993.

P30. Evaluación electroquímica del 2-aminotiazol mediante técnicas a potencial controlado

Andrés Felipe Villamaria, Jimmy Alexander Morales Morales, Universidad Santiago de Cali.

Resumen: En esta etapa del proyecto se planteó la evaluación electroquímica del 2-aminotiazol (2-AT) mediante técnicas electroquímicas a potencial controlado para obtener conocimiento de su comportamiento electroquímico hacia la oxidación. Lo anterior permitió ampliar el conocimiento sobre el comportamiento electroquímico de este tipo de compuestos, el efecto del medio de reacción. Lo anterior fue evaluado mediante voltamperometría en la región anódica y medio aprotico y acuoso, evidenciando su electropolimerización, como electrolito soporte fue utilizado Tetra n-butilamonio hexafluorurofosfatos, en el caso del medio acuoso se utilizó Oxalato de amonio.

Palabras clave: Aminotiazol, Electropolimerización, voltametría

Introducción: Los tiazoles son compuestos heterocíclicos de cinco miembros, que contienen heteroátomos de nitrógeno y azufre. El 2-amino tiazol es atractivo para la gran mayoría de investigadores por su estabilidad térmica y excelentes propiedades conductoras, mientras la introducción del grupo amino, tiene potencial de oxidación bajo, una alta reactividad química y fácil polimerización química oxidativa comparada con la tiazida. También ha sido demostrado que tienen una buena estabilidad electroquímica. Son parcialmente solubles en DMSO, pero insolubles en AC, THF, ACN, DCM, DMF, y en soluciones ácidas, lo que puede ser de gran interés para la protección contra la corrosión de materiales. Debido a estructura química y electrónica, los aminotiazoles pueden ser involucrados en una variedad de reacciones bioquímicas, estos tienen funciones como antimicrobianas y antitumorales. Poseen propiedades anticorrosivas. Modifican la sílice gel como un selector de iones de Hg (II), Cu (II), Ni (II) y Pd (II). También pueden funcionar como inhibidores orgánicos debido a su gran número de enlaces π , reduciendo el número de sitios activos en la superficie del metal a través de la adsorción y actuando como una barrera que reduce el transporte de agentes corrosivos y suministra una protección anódica. Estas propiedades pueden ser mejoradas a través del aumento de grupos funcionales después de su polimerización. A parte de esto, los poliaminotiazoles podrían tener propiedades eléctricas y ópticas con la formación de grandes estructuras π conjugadas. Entonces los poliaminotiazoles se convierten en un nuevo material polimérico y orgánico por encima de los polímeros conductores tradicionales. Han sido electro polimerizados reportando propiedades semi conductoras en los rangos de $10^{-4} - 10^{-8} \text{ Scm}^{-1}$. La conductividad de los polímeros de tiazoles puede ser incrementada mediante una reacción de dopamiento.

Metodología: **Voltamperometría cíclica en medio aprotico:** El comportamiento redox del monómero y el polímero fue determinado por voltamperometría cíclica (CV). El sistema consiste en un potencióstato marca Metrohm modelo PGSTAT128N y la celda CV contiene un electrodo de trabajo de Pt o Titanio, un cable de Pt como contra electrodo y un electrodo de Ag/AgCl como electrodo de referencia. Las mediciones fueron llevadas a cabo en una atmósfera de N₂ en acetonitrilo en un cuarto de temperatura a un potencial de 0 a 2,70V.

Voltamperometria cíclica en medio acuoso: El comportamiento electroquímico fue estudiado en una concentración del monómero a 0,2M, un sistema de tres electrodos que contiene un electrodo de trabajo de Pt, un cable de Pt como contra electrodo y una electrodo de Ag/AgCl como electrodo de referencia. Las mediciones fueron llevadas a cabo en una atmosfera de N₂ en oxalato de amonio en un cuarto de temperatura a un potencial de 0 a 2,70V.

Resultados: Se evidenció el proceso electroxidativo de 2-aminotiazol en medio acuoso y aprótico. En ambos casos el resultado está mostrando que el nuevo producto que surge como consecuencia de barridos sucesivos de potencial, corresponde posiblemente a una especie polimérica de baja conductividad.

Referencias:

1. Cruz, J; Garcia-Ochao E; Castro M. (2003). Experimental and Theoretical Study of the 3-Amino-1,2,4-triazole and 2-Aminothiazole Corrosion Inhibitors in Carbon Steel. J. Electrochemical. Soc, 150, B26.
2. Newton L. Dias F., Devaney R. do Carmo, André H. (2006). An electroanalytical application of 2-aminothiazole-modified silica gel after adsorption and separation of Hg(II) from heavy metals in aqueous solution. Electrochimica Acta, 52, 965
3. Zhou X; Shao L; Zhong J; Liu B; Dai H; Fang X.J. (2007). Synthesis and antitumor activity evaluation of some schiff bases derived from 2-aminothiazole derivatives. Heteroatom. Chem. , 18, 55.
4. Frank W; Cantrell A; Kinnick M; Jazcunas R. (1995). Phenethylthiazolethiourea (PETT) compounds, a new class of HIV-1 reverse transcriptase inhibitors. 1. Synthesis and basic structure-activity relationship studies of PETT analogs.. J. Med. Chem, 38, 4929-36.
5. Solmaz R; Kardas G. (2009). R. Solmaz, G. Kardas, Prog. Org. Coat. 64 (2009) 81–88.. Prog. Org. Coat. , 64, 81-88.

P31. Síntesis de un sistema químico protector por electrodeposición sobre acero inoxidable 304 y titanio

Viviana Dominguez Velez, Jimmy Alexander Morales Morales, Universidad Santiago de Cali.

Resumen: Los fosfatos de calcio se obtuvieron reduciendo los iones nitrato para producir iones hidróxido sobre TiO_2 / acero inoxidable y electrodos TiO_2 / titanio. Los revestimientos de TiO_2 sobre sustratos metálicos se prepararon mediante un método de revestimiento por inmersión en sol - gel. La morfología de los depósitos fue observada por FESEM. La naturaleza química de los depósitos de fosfato de calcio se identificó mediante microespectroscopia Raman y microanálisis FESEM / EDS. El comportamiento electroquímico de la reducción de nitratos y nitritos en electrodos de acero inoxidable y titanio se estudió mediante voltamperometría de barrido lineal. Además, se realizó un estudio voltamétrico de la electrodeposición de fosfato cálcico en ambos electrodos. A partir de estas mediciones se seleccionó el potencial para formar un fosfato de calcio. Se obtuvo una corriente catalítica asociada a la reacción de reducción de nitratos para el electrodo de acero inoxidable, lo que condujo a una deposición significativa de fosfato de calcio. La relación Ca / P para ambos sustratos fue menor que 1,67. La formación de hidroxiapatita deficiente en calcio fue confirmada por espectroscopia Raman.

Palabras clave: Recubrimiento, corrosión, biomaterial, electroquímica, biocerámico

Introducción: Se define como biomaterial a un material diseñado para actuar interfacialmente con sistemas biológicos con el fin de evaluar, tratar, aumentar o reemplazar algún tejido, órgano o función del cuerpo. Tradicionalmente en los estudios de los biomateriales, se ha realizado un enfoque de cuestiones, tales como la biocompatibilidad, las reacciones del tejido receptor hacia el implante, la citotoxicidad y las propiedades estructurales del implante. Los biomateriales pueden tener propiedades especiales, que pueden ser utilizadas para conocer las necesidades de una aplicación clínica en particular. Un biomaterial puede ser biocompatible, no cancerígeno, resistente a la corrosión, de baja toxicidad, y escaso desgaste. Sin embargo dependiendo de su aplicación, diferentes requerimientos surgen y en ocasiones pueden ser completamente opuestos. Un biomaterial debe ser: Biocompatible, Esterilizable, Funcional y Manufacturable. Entre los biomateriales se encuentran los materiales sintéticos, que pueden ser: Polímeros (Polimetilmetacrilato, PEEK, etc); Materiales compuestos (Composites); Cerámicas (Alúmina, hidroxiapatita, fosfato tricálcico, etc.) y Metales (Acero, Ti, Ti-aleaciones, Cr-Co, Ta). (Pino Mínguez, 2008). A continuación se encuentran las características de biomateriales de tipo metálico.

Resultados: La Figura 1 muestra imágenes de FESEM de revestimientos de CP electrodepositados sobre TiO_2 / SS y TiO_2 / Ti. El depósito de CP es capa más uniformemente sobre el sustrato SS (figura 1a, a') que sobre el sustrato de Ti (figura 1b, b'). Con el fin de determinar la naturaleza química de la PC electrodepuesta, la relación Ca / P se estimó a partir del análisis de EDS. Se determinó una relación Ca / P de 1,51 y 1,57 para TiO_2 / SS y TiO_2 / Ti, respectivamente. Esto sugiere la formación de CDHAp porque Ca / P < 1,67 (Madhumathi & Sampath Kumar, 2014). De hecho, los valores de Ca / P determinados a partir de EDS corresponden a un promedio de composición química, y pueden estar presentes más de una especie de CP. Por lo tanto, se requiere otra técnica para confirmar la presencia de CDHAp. La Figura 1c muestra el espectro Raman de CP

depositado sobre TiO_2 / SS . Los picos típicos de la fase anatásica de la película de TiO_2 aparecen a 140.3 cm^{-1} , 191.4 cm^{-1} , 393.3 cm^{-1} , 512.9 cm^{-1} y 635.7 cm^{-1} . El pico centrado en 958.4 cm^{-1} es representativo del depósito de CP en TiO_2 / SS y TiO_2 / Ti , y se ha atribuido comúnmente a HAp (Cukrowski, y otros, 2007). Tenga en cuenta los resultados EDS y la similitud estructural entre HAp y CDHAp (Madhumathi & Sampath Kumar, 2014), CP depósito corresponde a CDHAp.

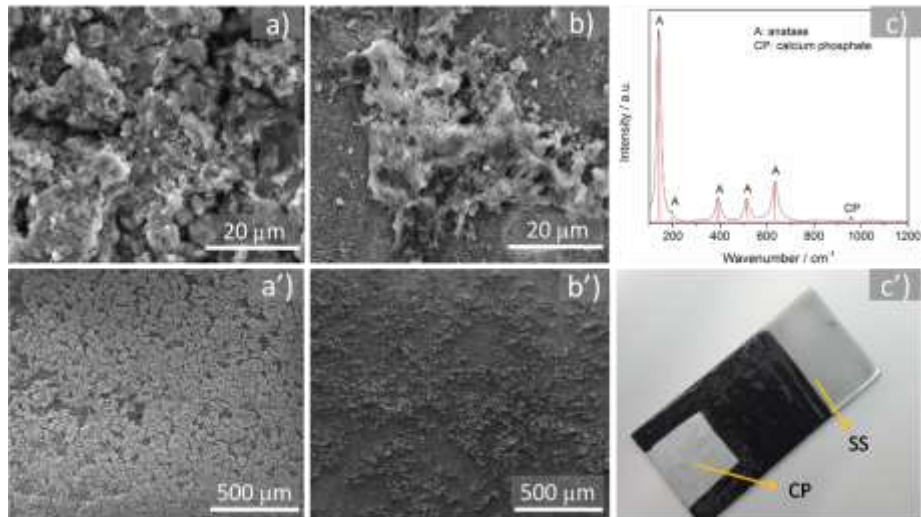


Figura 1. Imágenes FESEM de CP electrodepositadas sobre sustratos TiO_2 / SS (a, a') y TiO_2 / Ti (b, b'). Espectro Raman típico y foto de CP depositado sobre SS (c, c').

Referencias: Cukrowski, I., Popović, L., Barnard, W., Paul, S., van Rooyen, P., & Liles, D. (2007). Modeling and spectroscopic studies of bisphosphonate–bone interactions. The Raman, NMR and crystallographic investigations of Ca–HEDP complexes. *Bone*, 41: 668–678.

kalpakjian, S., & Schmid, S. (2002). *Manufactura, ingeniería y tecnología*. México: Pearson Educación. Madhumathi, K., & Sampath Kumar, T. (2014). Regenerative potential and anti-bacterial activity of tetracycline

P 32. Síntesis y Caracterización de Nanorecubrimientos de Nitruros de Cobre (Cu₃N) Logrados por la Técnica de Pulverización Catódica, para Aplicaciones en Electrónica Flexible

Daniela Martinez Bellaiza, Jimmy Alexandre Morales Morales. Universidad Santiago de Cali.

Resumen ejecutivo: Se realizó la síntesis y caracterización de nanorecubrimientos (películas delgadas) de nitruro de cobre (Cu₃N), mediante Sputtering asistida por magnetrón, en donde se determinó la influencia de variables como flujo de N₂ en un rango de 3-20 cm³.min⁻¹, tiempo de reacción, y potencia aplicada (60-80 W), sobre propiedades del material, como son: espesor del recubrimiento, composición química y propiedades eléctricas para aplicaciones en la electrónica flexible.

Palabras clave: Nanorecubrimiento, nitruros de cobre, electrónica flexible.

Introducción: Actualmente la tecnología marca un papel muy significativo dentro de la sociedad; el desarrollo de esta ha ayudado a conquistar las barreras de la comunicación y reducir la brecha entre las personas en todo el mundo, por esto es que se ha venido implementado e innovando en esta materia. Un ejemplo muy claro de ello son las investigaciones que se han venido adelantando sobre la electrónica flexible, ya que ha resultado ser un tema de gran interés. La pulverización catódica asistida por magnetrón se ha convertido en el proceso de elección para la deposición de una amplia gama de revestimientos de importancia industrial. Los ejemplos incluyen revestimientos duros, resistentes al desgaste, revestimientos de baja fricción, recubrimientos resistentes a la corrosión, revestimientos decorativos y recubrimientos con propiedades ópticas o eléctricas específicas. Aunque el proceso básico de pulverización catódica ha sido conocido y usado desde hace muchos años, es el desarrollo del magnetrón desequilibrado y su incorporación en sistemas de "campo cerrado" multi-fuente que han sido responsables del aumento de importancia de esta técnica. El bombardeo por magnetrón desequilibrado de campo cerrado es una técnica excepcionalmente versátil para la deposición de películas de alta calidad y bien adheridas. La composición química y física, la orientación y las propiedades de las superficies difieren de las del interior del sólido macizo. Las técnicas actuales de caracterización de superficies, se clasifican en dos amplias categorías: las que se centran en unas pocas capas más exteriores y las que incluyen en su enfoque los componentes presentes varios millares de angstroms hacia el interior del sólido.

Resultados: Como primera medida se realizó la parametrización del equipo (Sputtering) para poder depositar películas delgadas de nitruro de cobre, estableciendo los parámetros y condiciones adecuadas a las cuales se debe realizar la deposición con una perfecta formación del plasma, un excelente crecimiento de las películas y una buena adhesión de las mismas.

El potencial aplicado creaba el plasma el cual era encargado de ionizar el gas de arrastre (argón) y que este pudiera bombardear la superficie del blanco de cobre, y de esta manera soltara los átomos que serán depositados sobre el sustrato. El gas de arrastre se mantuvo a un flujo de $15 \text{ cm}^3 \cdot \text{min}^{-1}$, ya que si se disminuía no se formaba el plasma, y además esta variable se dejó quieta para poder analizar los demás aspectos contribuyentes en la formación de las películas. A medida que se aumentaba el flujo del gas precursor (nitrógeno) en el depósito, se notaba un cambio de coloración en las películas muy significativo, tal como se muestra en las siguientes imágenes:



Fig. 1. Deposito de Cu_3N 3/15 N_2/Ar (2 min)



Fig. 2. Deposito de Cu_3N 10/15 N_2/Ar (2 min)



Fig. 3. Deposito de Cu_3N 20/15 N_2/Ar (2 min)



Fig. 4. Deposito de Cu_3N 20/15 N_2/Ar (3 min)

A medida que se iba aumentando el flujo de nitrógeno, la película tornaba un color más plateado, dejaba ese color cobrizo que tenía para ir cogiendo un tono más brillante plata, esto se debe a que los átomos de nitrógeno van desplazando los de cobres.

Referencias: Aguilar, M., (2001). Bioelectromagnetismo: Campos eléctricos y magnéticos y seres vivos. Madrid – España.

Cortes, H.; Martínez, P.; Valencia, H. (2006). Fundamentos de Cristalografía. Editorial Elizcom. Quindío – Colombia. Pág. 79.

Kim, K. J., Kim, J. H., & Kang, J. H. (2001). Structural and optical characterization of CuP. J. Kelly, (2000). Magnetron sputtering: a review of recent developments and applications. Disponible en:

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0042207X9900189>

P33. Obtener depósitos de fosfatos de calcio sobre titanio mediante técnicas simples de química húmeda

Jessica Realpe Jaramillo, Jimmy Alexander Morales Morales, Universidad Santiago de Cali.

Resumen ejecutivo: Se realizaron síntesis de nanopartículas de hidroxiapatita (HA) bioactiva partiendo de técnicas de precipitación controlada y sol-gel donde la HA fue ajustada de pH, envejecida y depositada por inmersión- deposición en placas de titanio. Los revestimientos fueron estudiados mediante microscopia electrónica de barrido por emisión de campo FESEM, espectroscopia de dispersión de energía EDS, espectroscopia IR-ATR y Raman que evidenciaron bandas vibracionales pertenecientes a grupos fosfatos. Los resultados obtenidos afirman que las películas están compuestas por fases de TiO_2 e HA, donde la cristalinidad y la relación Ca/P de HA aumenta a través del envejecimiento de la síntesis y aplicado en el sustrato de titanio revestido. Los resultados de EDS mostraron compuestos deficientes en calcio con relaciones Ca/P de 1,52 y 1,58 parecidos a la relación Ca/P de la apatita natural. Los resultados espectroscópicos sugirieron la presencia de una mezcla de fosfato octacálcico lo cual manifiesta recubrimientos óptimos partiendo de síntesis de HA envejecida para utilidades biomédicas por métodos simples de química húmeda.

Palabras clave: Hidroxiapatita, Precipitación Controlada, Sol-gel

Introducción: La hidroxiapatita de calcio, de fórmula empírica $[\text{Ca}_{10} (\text{PO}_4)_6 (\text{OH})_2]$, referente como HA, es un material cerámico biocompatible, biodegradable y bioactivo, a base de fosfato de calcio que constituye en el estudio y caracterización de materiales de dominio biomédico, puesto que es previamente estable, capaz de interactuar y unirse químicamente en constituyentes de huesos, el esmalte dental y la dentina [1, 2, 3]. La apatita proveniente de HA es conocida por sus propiedades de intercambio iónico, afinidad de adsorción y su capacidad para establecer enlaces con moléculas orgánicas e inorgánicas de distintos tamaños [2]. Cuando se inicia una síntesis de HA con óxidos de sales o compuestos inorgánicos, se debe añadir una mezcla mecánica extensa de tratamientos prolongados a altas temperaturas [4]. Los avances investigativos para el desarrollo de recubrimientos con HA aumentan a diario y conllevan a la introducción de ciertas estrategias como; en la influencia de sustratos nanoporosos de óxido de titanio anódico con revestimientos de HA [5], recubrimientos de HA en capas separadas [6], nanotubos de TiO_2 obtenidos por oxidación anódica en sustratos de titanio [7], entre otros [8]. En este estudio, se efectúa la obtención de nanopartículas de hidroxiapatita mediante técnica de química húmeda.

Metodología: *Obtención de hidroxiapatita por técnica de precipitación controlada*

El material para la síntesis tuvo una previa limpieza con soluciones de HCl 0.1 M, mezcla sulfocrómica 1% (v/v), acetona y un secado continuo a 90 °C. La síntesis de hidroxiapatita se basó en la combinación de 0,1 M de nitrato de calcio tetrahidratado [Ca (NO)₃ · 4H₂O] y 0,06 M de fosfato dihidrogenado de amonio [NH₄H₂PO₄], se empleó hidróxido de sodio para un ajuste de pH 10-11. La solución inicial de Ca (NO)₃ · 4H₂O se transfirió a una bureta para después ser agregada por goteo controlado sobre la solución de NH₄H₂PO₄, manteniendo agitación constante. Una vez concluida la adición, se continuó la agitación por 2 horas más. El precipitado se dejó envejecer; la primera síntesis tuvo un periodo de envejecimiento de meses, la segunda y tercera síntesis tuvieron 3 y 9 días de envejecimiento. En el lapso del envejecimiento, se realizaron lavados por filtración con etanol, agua destilada y centrifugación del precipitado HA. El secado de la HA fue a una temperatura de 80 °C por 72 h. Se calcinaron las muestras en crisoles a 700 °C por 4 h. Las síntesis se sometieron análisis de Espectroscopia IR – ATR, Espectroscopia RAMAN, DRX

Síntesis de recubrimiento inorgánico TiO₂ por método sol gel

Para la obtención del óxido de titanio [TiO₂], se requirió de un recipiente de 100 mL la cual se adicionó 16 mL de etanol anhidro 99.99% de pureza, 1 mL de acetil acetona. Se añadió 3.5 mL de terc-butoxido de titanio. Finalmente, se agregó 0.7 mL de agua des ionizada. Las soluciones se añadían en constante agitación. Se envejeció por 7 días.

Preparación superficial del sustrato

Se empleó titanio como sustrato, el corte predominante del sustrato era de 2 x 2,5 cm. Cada sustrato tuvo un desbaste convencional con agua desionizada el cual consiste en someter las placas a diferentes grados de lijas, creando una uniformidad en dirección vertical de lijado por un periodo de 2 minutos por placa. Se insertaron en un recipiente con acetona y se llevó a ultrasonido. Secaron a temperatura ambiente.

Dip-Coating; Recubrimiento con TiO₂ e Hidroxiapatita en sustratos metálicos

Se sumergieron 2 placas de titanio en una solución TiO₂ envejecida. El tiempo de inmersión y deposición para cada placa fue de 1 minuto. Se realizaron secados a 100 °C/1 h, calcinado a 450 °C por 4 horas. Como segundo paso, se adicionaron las placas en hidroxiapatita envejecidas por 3 y 9 días. Se dejaron a temperatura ambiente por 12 horas, se les efectuó un secado a 100 °C por 1 hora y un calcinado de 450 °C/4 h. El secado de las 2 placas de acero AISI 304L con alambre de cobre fue de 100 °C/h y calcinado de 750 °C/4 h. Se analizaron por técnicas IR-ATR, Raman, FESEM, EDS y DRX.

Referencias:

Rasha A. Y, Mohammed A. T, Hanan E., Medhat I. 2017 *Materials Chemistry and Physics* **190** 209 – 218 . Moussa S. B, Bachoua H., Gruselle M., Beaunier P., Flambard A., Badraou B.

P34. Síntesis, caracterización y estudio de la reducción electroquímica de algunos *p*-sustituidos 2-aminotiazoles. un combinado estudio experimental y computacional

Melina Salazar Osorio, William Santacruz Parra, Jimmy Alexandre Morales Morales. Universidad Santiago de Cali.

Resumen: En este proyecto se plantea la síntesis del derivado para-sustituidos 2-aminoiltiazol y su respectiva caracterización, posterior a esto se realizará el estudio de la reducción electroquímica en medio aprótico, mediante técnicas voltamperométricas, empleando como medio de reacción Acetonitrilo MeCN o Dimetil sulfóxido DMSO, y electrodo solido de carbón viteo como electrodo de trabajo. El análisis y conocimiento sobre la reducción electroquímica de estos derivados en medio aprótico, permitirá evaluar el efecto de diversos parámetros estructurales como la influencia del sustituyente, efectos electrónicos, estructura química y medio de reacción sobre su comportamiento voltamperométrico. Se discutirá la relación de los datos experimentales con simulaciones numéricas basadas en principios variacionales (teoría del funcional de la densidad). Lo anterior podría contribuir con conocimiento para la comprensión del comportamiento electroquímico de estos compuestos y al rediseño de estructuras heterocíclicas con mejor reactividad biológica y potencial aplicación industrial.

Palabras clave: Electroreducción, heteroaromáticos, voltamperometría, aminotiazoles.

Introducción: El anillo de tiazol representa una interesante clase de compuestos heterocíclicos. Los derivados de tiazol juegan un papel importante en las funciones biológicas, tales como antimicrobianos, antidiabéticos, antivirales, antiinflamatorios, antituberculosos y anticancerosos¹⁻⁹. Desde hace varias décadas se ha venido trabajando en la síntesis y evaluación de las propiedades fisicoquímica de este tipo de compuestos¹⁰⁻¹¹. En particular, los derivados *p*-sustituidos 2-aminotiazoles tienen características farmacéuticas y se utiliza en aplicaciones industriales¹²⁻¹⁴. Los compuestos de tiazol también se han utilizado en aplicaciones electroquímicas¹⁵⁻²². Aunque ha habido un interés en el estudio electroquímico de estos compuestos heterocíclicos, específicamente en el caso de la reducción electroquímica de *p*-sustituidos 2-aminotiazoles y el cómo ésta reducción es influenciada por cambios estructurales en las moléculas, no ha sido estudiada. Es por lo anterior que en la presente investigación se pretende el estudio electroquímico de derivados *p*-sustituidos 2-aminotiazoles, cuyas reactividades electroquímicas dependen de manera esencial de las propiedades redox del anillo heterocíclico y de las propiedades de los intermediarios que se forman, en este caso, por electro-reducción, además la discusión de la relación de los datos experimentales con cálculos de química cuántica, constituye una herramienta valiosa para comprender la importancia de estos efectos estructurales en su reactividad electroquímica. Lo anterior podría contribuir con conocimiento para la

comprensión del comportamiento electroquímico de estos compuestos y al rediseño de estructuras heterocíclicas con mejor actividad biológica y potencial aplicación industrial.

Resultados: Se llevo a cabo la reacción para la obtención del derivado 4-fenil-2-aminotiazol con un tiempo de reflujo a 120°C de 2 horas, con 1,3170 g de tioura, 1 mL de acetofenona y 2,2308 g de yodo. Se realizó por duplicado, la otra reacción fue realizada con 1,3398 g de tiourea, 1 mL de acetofenona y 2,2443 g de yodo. Teniendo en cuenta que el reactivo limite es la acetofenona, se realiza el cálculo para determinar la cantidad teórica:

$$0,0086 \text{ mol acetofenona} * \frac{1 \text{ mol 2-amino-4-feniltiazol}}{1 \text{ mol acetofenona}} * \frac{176 \text{ g 2-amino-4-feniltiazol}}{1 \text{ mol 2-amino-4-feniltiazol}} = 1,5136 \text{ g}$$

A continuación se presentan los porcentajes de rendimiento obtenidos:

$$\text{Muestra 1} = \frac{0,0362 \text{ g experimentales}}{1,5136 \text{ g teóricos}} * 100 = 2,4\% \quad \text{Punto de fusión: } 146^{\circ}\text{C}$$

$\text{Muestra 2} = \frac{0,0434 \text{ g experimentales}}{1,5136 \text{ g teóricos}} * 100 = 2,9\%$ Punto de fusión: 148°C Al observar porcentajes de rendimientos tan bajos, se procedió a llevar a cabo la reacción con un tiempo de reflujo de 8 horas a 90°C, con 7,6 g de tiourea, 5,8 mL de acetofenona y 12,7 g de yodo, obteniendo los siguientes resultados:

$$5,6 \text{ mL Acetofenona} * \frac{1,03 \text{ g ac.}}{\text{mL ac.}} * \frac{1 \text{ mol ac.}}{120 \text{ g}} * \frac{1 \text{ mol 2-amino-4-feniltiazol}}{1 \text{ mol ac.}} * \frac{176 \text{ g}}{1 \text{ mol 2-amino-4-feniltiazol}} = 8,7618 \text{ g}$$

$$\% \text{ de rendimiento: } \frac{7,7103 \text{ g experimentales}}{8,7618 \text{ g teóricos}} * 100 = 88\% \quad \text{Punto de fusión: } 143^{\circ}\text{C.}$$

A estos productos obtenidos, se les realizaron sus respectivos espectros IR en el equipo AGILENT CARY 630 FTIR. Las muestras presentaron picos muy similares lo que hace inferir que se trate del mismo compuesto, en general presentaron picos característicos de los grupos funcionales que tiene el compuesto de interés. Por ejemplo para el grupo amino en 3430-3248 cm⁻¹, picos en 1515 cm⁻¹ para C=N y picos en 1201 para C-N, además de los picos característicos para el anillo aromático. En este momento se continúa con el análisis de la caracterización de las muestras, tanto por espectroscopia IR como por Resonancia electromagnética nuclear.

Referencias:

- 1] Ulusoy N, Kiraz M, Kucukbasmaci O. New 6-(4-bromophenyl)imidazo[2,1-b]thiazole derivatives: Synthesis and antimicrobial activity. *Monatsh Chem* 2002; 133: 1305-1315. [2] Kaplancikli ZA, Turan-Zitouni G, Revial G, Guven K.. Synthesis and study of antibacterial and antifungal activities of novel 2-[[[(benzoxazole/benzimidazole-2-yl)sulfanyl] acetylamino]thiazoles. *Arch Pharm Res* 2004; 27: 1081-1085.

P35. Síntesis enantiomérica de dibromuro de difeniletildiamonio (DFEDA-Br 2)

Adrian Gurrute, Andres Delgado, Luis A. Lenis, Jeyson A Cortes, Universidad del Cauca.

Resumen: La síntesis de los enantiomeros de la diamina quiral, de dibromuro de difeniletildiamonio (Br 2 -DFEDA), se llevó a cabo en cinco etapas de reacción, con materiales de partida económicos y de fácil acceso como el benzaldehído y el amoniaco. Se ve evidenciado la acción de la radiación de microondas debido a que se disminuye los tiempos de reacción en cada una de las etapas, además de obtener porcentajes de rendimiento aceptables en concordancia con reportes anteriores de este tipo de reacciones.

Palabras clave: Enantiomeros, Diamina quiral, Microondas, Benzaldehido.

Introducción: La técnica de microondas es muy utilizada en la actualidad para activar reacciones químicas, debido a que esta aprovecha la capacidad de algunos compuestos de transformar la energía electromagnética en calor. Esto quiere decir que el sistema se calienta de forma uniforme, lo que no ocurre en el calentamiento convencional que es por conducción o convección. Nadir & Singh (2005), reportan la síntesis de diaminas quirales, utilizando como precursores, las N-Tosilaziridinis y montmorillonita K-10 como catalizador, mediante radiación de microondas, obteniendo rendimientos entre 84 y 98%, en tiempos cortos de reacción. En este trabajo se utilizó la radiación microondas para la síntesis de diaminas quirales.

Metodología: Se lleva a cabo en cinco etapas de reacción, en las cuales el calentamiento lo proporciona la radiación por microondas; en la primera se obtiene la hidrobencamida a partir del benzaldehído e hidróxido de amonio, por condensación; en la segunda etapa se obtiene la isoamarina racémica por ciclación térmica; en la siguiente etapa se realiza la resolución de la mezcla racémica utilizando ácido mandélico; en la penúltima etapa se obtiene la diamida de difeniletildiamina por apertura del anillo, utilizando acetato de sodio en anhídrido acético y ácido clorhídrico. Finalmente se obtiene las sales de dibromuro de difeniletildiamonio, por medio de la hidrólisis de la diamida correspondiente utilizando una mezcla entre ácido bromhídrico y ácido acético glacial.

Referencias: Nadir, U. K., & Singh, A. (2005). *Tetrahedron Letters*, 46(12), 2083–2086.

Cortés, J. (2015). Síntesis y caracterización de (+)-(1*R*,2*R*)- y (-)-(1*S*,2*S*)-1,2-difenil-1,2-etildiamina (diamina quiral con simetría- C_2) vía acoplamiento reductivo de iminas y obtención de enantiómeros puros por resolución óptica fraccional. (Tesis de Grado: Químico). Universidad del Cauca, Popayán (Colombia).

P36. Síntesis y caracterización de nuevas espirooxindol pirrolizidinas

Manuel Julian Arboleda Arango, Jairo Quiroga Puello, Pablo Romo.
Universidad del Valle.

Resumen: Se obtuvo una serie de nuevos cicloaductos, de tipo espirooxindol, condensando iluros de azometino generados in situ con un alqueno activado, a través de cicloadición 1,3 dipolar. La elucidación estructural de estos compuestos se realizó con espectroscopia RMN 1D y 2D, para observar

Palabras clave: Cicloadición 1,3 dipolar, espirooxindol, estereo y regio selectividad.

Introducción: Entre los diversos heterociclos nitrogenados presentes en muchos compuestos naturales, agentes medicinales, alcaloides se encuentran los espirooxindoles funcionalizados con anillos pirrolidinicos y pirrolizidínicos, que presentan actividades biológicas como antiinflamatorios, antimaláricos, anticancerígenos, entre otras. El desarrollo de metodologías sencillas, con economía molecular, para la síntesis de este tipo estructuras que puedan presentar perfil biológico, es de continuo interés para el químico sintético.

Metodología: Una mezcla equimolar de isatina, L-prolina y trans-1,2-dibenzoiletileno, en 3mL de etanol bajo reflujo y agitación, por 60 min, para la precipitación de los compuestos objetivo, sin necesidad de catalizadores. De acuerdo a la placa cromatográfica había producto soluble en el crudo de reacción, para favorecer la precipitación de estos la mezcla se enfrió en baño de hielo. El sólido fue filtrado y lavado con etanol frío, obteniendo puro los cicloaductos deseados.

Resultados: Se obtuvo una serie de 10 nuevos espirooxindoles que incorporan en su estructura el grupo benzoilo, con buenos rendimientos (50-80%). Los productos mostraron alta estereoselectividad, obteniéndose un único regiosímero y la reacción fue regioselectiva respecto al dipolarófilo. Los compuestos están siendo evaluados en el NCI (National Cancer Institute) para evaluar su actividad anticancerígena.

Referencias: Singh, M. S.; Chowdhury, S.; Koley, S. *Tetrahedron* 2016, 72, 1603–1644. Harwood, L. M.; Vickers, R. J. In *Synthetic Applications of 1,3-Dipolar Cycloaddition Chemistry Toward Heterocycles and Natural Products*; John Wiley & Sons, Inc., 2003; pp. 169–252. Trost, B. M.; Brennan, M. K. *Synthesis* (Stuttg). 2009, 3003–3025.

P37. Síntesis de ésteres y amidas desde un alcaloide obtenido del ají (*Capsicum annum*)

Kevin Alexander Vallecilla Grueso, Jhoan Manuel Zuluaga Patiño,
Universidad del Quindío.

Resumen: El presente trabajo pretende trabajar en dos frentes, uno es desde el campo de la fitoquímica, en la cual se pretende obtener alcaloides desde un material vegetal (Ají, *Capsicum annum*) y el segundo es realizar un trabajo de síntesis con el metabolito aislado y ponerlo en contacto con diversos compuestos: reactivos del laboratorio y fármacos específicos que se encuentran en el mercado.

Palabras clave: Capsaicina, hidrolisis básica, cloración, esterificación y amidación.

Introducción: La capsaicina es el compuesto responsable del sabor picante en el ají, la cual está en un 90%, tiene un peso molecular de 305.199 g/mol, es soluble en solventes orgánicos como éter etílico, alcohol etílico, acetona, alcohol metílico, tetracloruro de carbono y benceno. La hidrolisis del alcaloide se lleva a cabo en medio básico, generando como producto el ácido 8-metil 6-trans nonenoico y la vanillilamina. La cloración del ácido 8-metil 6-trans nonenoico utilizando cloruro de tionilo, convierte este ácido en un cloruro de acilo, el producto de esta reacción sería cloruro de 8-metil 6-trans nonenoilo. Para la obtención de ésteres y amidas a partir de un cloruro de acilo, este reacciona con alcoholes para producir ésteres y con aminas primarias y secundarias para producir amidas.

Metodología: Se realizó el tamizaje fitoquímico al ají (*Capsicum annum*), posteriormente se llevó a extracción por métodos convencionales (soxhlet) utilizando como solvente etanol al 95%. Para el aislamiento del alcaloide se realiza en medio neutro para la precipitación del alcaloide, una vez obtenido se realiza la hidrolisis básica con KOH etanólico al 10% para la obtención del ácido carboxílico. Este compuesto se hace reaccionar con cloruro de tionilo para obtener un cloruro de acilo. Ya obtenido el haluro se hacen reaccionar con fármacos que contengan alcoholes y aminas para obtener ésteres y aminas respectivamente.

Referencias: Capsaicin Content and Pungency of Different *Capsicum* spp. Cultivars. K. Sanatombi, G. J. Sharma.. Efectos farmacológicos de la capsaicina, el principio pungente del chile. Luis A. Salazar-Olivo y Claudia O. Silva-Ortega. México. 2004.
Long-Solis, J. 1998. *Capsicum* y cultura: La historia del chilli. México: Ed. Fondo de Cultura Económica.

P38. Estudio teórico-experimental de la síntesis y propiedades físico-químicas de derivados de N-bencil Furfurilamina

Jeisson David Corredor Montaña, Jovanny Ales Gomez, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia

Resumen ejecutivo: Desde tiempos inmemorables, la síntesis orgánica ha sido un área de gran importancia en el descubrimiento de nuevas especies que sean aplicables en los diversos campos de la farmacología, la ciencia y la industria. De la misma forma, en el siglo XX se ha puesto gran empeño en reestructurar las prácticas de ésta área, reemplazando las complejas y contaminantes metodologías, por otras más prácticas y amigables al medio ambiente. En el presente proyecto se aborda la síntesis de aductos Diels Alder de N-Bencil furfurilamina, los cuales pueden emplearse como sintones de reacción para preparar moléculas con estructura privilegiada como los Isoindolones. La síntesis se desarrolla empleando la metodología reportada por autores como Varlamov [1] y Sarang [2] y se replantea con métodos de química verde que han demostrado ser exitosos, tal es el caso de las Cicloadiciones Diels Alder desarrolladas en medio acuoso. Por otra parte, en los estudios mencionados se evidencia la incertidumbre en cuanto al mecanismo de reacción por el cual se forman los productos. Por tal razón, en el presente proyecto se opta por incluir cálculos computacionales que permitan proponer un mecanismo y caracterizar los productos de reacción. Es de pleno conocimiento que la química teórica, a través de la química computacional, ha enriquecido el conocimiento en las Ciencias Químicas y es una estrategia poderosa en el esclarecimiento de los fenómenos experimentales con explicaciones limitadas.

Palabras clave: Cicloadición Diels Alder, N bencil furfurilamina, Química Verde, Reacciones On water, Cálculos computacionales IRC.

Metodología: La síntesis orgánica se realizó optimizando las condiciones de reacción para precursores según lo planteado por la química verde y la cicloadición Diels Alder se realizó en tolueno y agua como medios de reacción. Se llevó a cabo la caracterización de los productos por técnicas como FTIR, RMN ^1H y ^{13}C . El estudio teórico permitirá proponer el mecanismo de reacción por el cual transcurre la reacción y la caracterización de los productos obtenidos. Los cálculos computacionales se efectuarán empleando la suite informática *Gaussian 09*, mediante cálculos ab-initio y teoría de los funcionales de densidad (DFT).

Resultados: La amina precursora y su derivado acilado han sido preparados empleando metodologías de química verde y química tradicional. La acilación tradicional genera una mezcla de confórmeros de la amida, evidenciada por los espectros de RMN. El aducto epoxiisindol obtenido en tolueno a reflujo presenta los isómeros endo y exo del compuesto. La reacción en agua transcurre a mucha mayor velocidad, y se propone que es selectiva en cuanto

al isómero formado. También se ha podido obtener el aducto con el derivado acilado de la amina empleando tolueno como solvente de reacción. En conclusión se ha logrado establecer un procedimiento más limpio y selectivo para la preparación de aductos tipo epoxiisindol empleando la metodología *on water* y se espera que los cálculos teórico computacionales permitan proponer un mecanismo de reacción.

Referencias:

1. Varlamov A V., Boltukhina E V., Zubkov FI, Sidorenko N V., Chernyshev AI, Grudin DG. Preparative Synthesis of 7-Carboxy-2-R-isindol-1-ones. Chem. Heterocycl. Compd. [Internet]. 2004;40:22–8. Available from: <http://link.springer.com/10.1023/B:COHC.0000023763.75894.63>
2. Sarang P, Yadav A, Patil P, Krishna U, Trivedi G, Salunkhe M. Synthesis of Advanced Intermediates of Lennoxamine Analogues. Synthesis (Stuttg). [Internet]. 2007;2007:1091–5. Available from: <http://www.thieme-connect.de/DOI/DOI?10.1055/s-2007-965950>
3. Welsch ME, Snyder S a, Stockwell BR. Privileged Scaffolds for Library Design and Drug Discovery. NIH Public Access. 2010;14:347–61.
4. Messeguer À. Los Químicos Y El Descubrimiento De Fármacos. Spanish ion Channel Initiat. Barcelona; 2010 Oct;
5. Peláez F. Paradigmas actuales en las etapas tempranas del proceso de descubrimiento y desarrollo de nuevos fármacos. An. Quím. 2011;107:36–45.
6. Reyes C, Muñoz F, Llanos G, Nuñez M, Torrecillas I. Estructuras privilegiadas basadas en productos naturales, alternativa en la búsqueda de nuevos agentes quimioterapéuticos. Biocancer. 2011;5:171–82.
7. Prajapati D, Borthakur D, Sandhu J. Intramolecular Diels-Alder Reaction with Furans: Effect of the Substitution Pattern Reinvestigated. J. Chem. Soc. 1993;40:142–3.

P39. Síntesis de Polipirrol y Acoplamiento Laminar a Películas de Ácido Poliláctico, Análisis Electroquímico y Evaluación como Sensor de Óxidos de Nitrógeno

William Fernando Patarroyo Hernandez, Oscar Julio Medina Vargas,
Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia.

Resumen ejecutivo: Se realizará dos tipos de síntesis para la obtención de polipirrol, electroquímica y química, esto con el fin de comparar la eficiencia como sensor electroquímico de óxidos de nitrógeno. Las películas estarán soportadas sobre ácido poliláctico con el fin de realizar un material biodegradable y de menor costo.

Introducción: A partir de la segunda guerra mundial los polímeros sintéticos obtenidos del refinado del petróleo remplazaron en numerosas aplicaciones a los materiales convencionales, hoy en día, sus aplicaciones van desde objetos de uso cotidiano hasta tecnologías de punta. (Ortiz, 2011) Los polímeros presentaban una propiedad que los diferenciaba, su naturaleza aislante, sin embargo, en 1964 W. A. Little abre la posibilidad de obtener polímeros conductores (Choy, 2008). Estos nuevos materiales, puros o dopados con moléculas que presenten características conductoras (pirrol, anilina, y tiofeno principalmente), han ofrecido nuevas aplicaciones a nivel científico y tecnológico. Entre las aplicaciones dadas a estos materiales existen baterías recargables, protectores electromagnéticos, sensores electroquímicos entre otros. (Cortés, 2006) Los óxidos de nitrógeno son gases inflamables e incoloros que aunque estén a bajas concentraciones son peligrosos para la salud humana, los detectores que se han creado ofrecen fiabilidad en las medidas, sin embargo necesitan ser operado en altas temperaturas lo que aumenta el gasto energético y disminuye la vida útil del sensor (Karmakar, 2017). Debido a la confirmación de la capa electrónica π en moléculas orgánicas con enlaces conjugados los electrones tienen las condiciones apropiadas para circular con cierta libertad, banda conductora. Debido a esta propiedad moléculas como pirrol anilina y tiofenol principalmente, en polimerización conducen electricidad. Los gases como los óxidos de nitrógeno interactúan con los polímeros conductores alterando la conductividad haciendo una reacción medible y cuantificable (Tebizi-Tighilt, 2013).

Metodología: Se sintetizará la película de polipirrol usando la técnica de oxidación química, como oxidante se usa FeCl_3 (Machida, Miyata, & Techagumpuch, 1989); la polimerización electroquímica se realizara usando electrodos de trabajo de platino o acero, un electrodo de referencia de Ag/AgCl a 0,8 V a condiciones normales (Díaz, M. Rojas, A. Vera, E. Cortes, 2005); el polipirrol se acoplará a películas de ácido poliláctico. Finalmente se expondrán estas películas a diferentes concentraciones de óxidos de nitrógeno y se

determinara su conductividad comparándola con un control que se tomará en un ambiente inerte.(Özcan, İlkbaş, & Özcan, 2017).

Referencias:

Choy, M. M. (2008). Polimeros semiconductores como alternativa tecnologica en la proteccion de nuestro ambiente. *Vasa*. Retrieved from <http://medcontent.metapress.com/index/A65RM03P4874243N.pdf>

Cortés, M. T. (2006). Desarrollo de Sensores Electroquímicos. *Revista Colombiana de Física*, 38(4), 1355–1358.

Díaz, M. Rojas, A. Vera, E. Cortes, M. (2005). SÍNTESIS ELECTROQUIMICAY CARACTERIZACIÓN ELECTRICA DE POLÍMEROS CONDUCTORES A PARTIR DE PIRROL. *REVISTA COLOMBIANA DE FÍSICA*, 37(2), 357–360.

Karmakar, N., Fernandes, R., Jain, S., Patil, U. V., Shimpi, N. G., Bhat, N. V., & Kothari, D. C. (2017). Room temperature NO₂ gas sensing properties of p-toluenesulfonic acid doped silver-polypyrrole nanocomposite. *Sensors and Actuators, B: Chemical*, 242(2), 118–126. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2016.11.039>

Machida, S., Miyata, S., & Techagumpuch, A. (1989). Chemical synthesis of highly electrically conductive polypyrrole. *Synthetic Metals*, 31(3), 311–318. [https://doi.org/10.1016/0379-6779\(89\)90798-4](https://doi.org/10.1016/0379-6779(89)90798-4)

Ortiz, J. A. R. (2011). Caracterización térmica y eléctrica de películas de polipirrol-copolímero de estireno-butadieno bajo ambiente oxidante, 62.

Özcan, A., İlkbaş, S., & Özcan, A. A. (2017). Development of a disposable and low-cost electrochemical sensor for dopamine detection based on poly(pyrrole-3-carboxylic acid)-

P40. Almidón modificado químicamente para la optimización de bioplásticos fotoactivos

Jorge Andrés Pulido Bonilla, Angelica Garcia Torres, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia

Resumen ejecutivo: El consumo mundial de los plásticos sintéticos provenientes del petróleo es más de 200 millones de unidades por año, con un incremento anual de aproximadamente un 5%. Algunas características como la alta resistencia a la corrosión, al agua y a la descomposición por medio de bacterias, convierte a estos materiales en residuos difíciles de eliminar y por ende en un problema ambiental (Flores, et al., 2014). Debido a esto, los bioplásticos obtenidos a partir de materias primas renovables como el almidón, la celulosa o la quitina, se han posicionado como una alternativa para reemplazar los empaques provenientes de materiales fósiles y así ser usados como empaques de alimentos, mejorando la seguridad y la calidad nutricional de estos, además de disminuir el impacto ambiental

Palabras clave: Almidón modificado, bioplástico fotoactivo, acetilación, oxidación, plastificantes.

Introducción: La prioridad de los empaques es la preservación y protección de todo tipo de productos, siendo los alimentos y algunas materias primas los campos de mayor prioridad (Villada, et al, 2007). En los alimentos, esta protección se lleva a cabo con el fin de extender el tiempo de vida útil preservando a la vez sus propiedades nutricionales y organolépticas, utilizando principalmente plásticos generados a partir de polímeros sintéticos de origen fósil (Villada et al., 2007). El encarecimiento del petróleo, junto con un aumento de las regulaciones medioambientales, actúan de forma sinérgica para promover el desarrollo de nuevos materiales y productos más compatibles con el medio ambiente (De Guillebon, 2011). No obstante, con el fin de mitigar el impacto ambiental generado por los sistemas de empaque con plásticos convencionales, se han propuesto diversas alternativas dentro de las cuales se encuentra la fabricación de empaques provenientes de materias renovables, conocidos comúnmente como bioplásticos; los cuales pueden provenir de cuatro fuentes bien diferenciadas: las de origen animal (colágeno/gelatina), de origen marino (quitina/quitosán), de origen agrícola (lípidos/proteínas/polisacáridos) y finalmente aquellas de origen microbiano (ácido poliláctico (PLA)/ y polihidroxialcanoatos (PHA) (De Guillebon, 2011).

Metodología: Se preparan suspensiones de almidón residual de papa en agua destilada con temperatura y proceso de agitación controlada, se llevan a pH de 8 para la acetilación del almidón y a pH de 9,5 para la oxidación con NaOH. Se agregara anhídrido acético en volúmenes controlados y manteniendo el pH para la reacción de acetilación del almidón (Phillips et al, 1999), así como se agregara a la otra suspensión hipoclorito de sodio al 5% y también se mantendrá el pH controlado de manera que pueda ocurrir la

reacción de oxidación (Wang, et al, 2003). Posteriormente se llevaran a pH de 4,5 y pH neutro respectivamente, se lavaran las muestras y se dejan secar. Ya con el almidón modificado se agregaran los extractos fotoactivos a emplear (clorofila, quercetina y curcumina) por medio de una suspensión en agua destilada y dimetilformamida (Martins et al, 2105), se procede al anclaje de estas. Obteniendo el almidón completamente modificado y con los fotoactivos mencionados anclados a él, se procede a producir los bioplásticos fotoactivos y con ellos determinar sus diferentes características y propiedades fisicoquímicas y mecánicas.

Referencias:

- Cardenia, V., Rodriguez-Estrada, M. T., Boselli, E., & Lercker, G. (2013). Cholesterol photosensitized oxidation in food and biological systems. *Biochimie*, 95(3), 473–481.
- Gina, P., Flores, N. C., & Romina, R.-S. (2014). Bioplásticos. *Revista Mexicana de BioTecnología*, 18(2), 27 – 36.
- Pardo, O. (2011). *Propiedades Fisicoquímicas y Mecánicas de Películas Obtenidas a Partir de Almidones de Arracacha (Tesis de Maestría)* Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia. Tunja. Colombia.
- De Guillebon, B. (2011). *Guía práctica sobre Bioplásticos*. *Remar*, Red de Energía y Medio Ambiente 5–10.

P41. Síntesis y caracterización de dióxido de titanio dopado con hierro para el mejoramiento de sus propiedades ópticas

Jheison Alexander Restrepo Ortiz, Hoover Valencia Sánchez, Universidad Tecnológica de Pereira

Resumen: Se sintetizó TiO_2 sin dopar y dopado por el método de Pechini a diferentes fracciones molares de hierro (0.1;0.2;0.4;0.6;0.8) determinando la actividad fotocatalítica de estos compuestos en la degradación del colorante orgánico azul de metileno, sometiendo cada uno de los compuestos a tres diferentes tipos de radiación: luz negra (400nm), luz blanca(400nm-800nm) y luz ultravioleta (200nm-280nm). Siendo superior la degradación de los compuestos con dopaje de hierro con fracciones molares de 0.1, 0.2 y 0.4 únicamente en la lámpara de luz negra, obteniéndose porcentajes de degradación del 36, 29 y 30% con respecto al 13% que obtuvo el TiO_2 sin dopar. Esto pudo deberse a un fenómeno de transferencia de carga que ocurre a los 400 nm entre el orbital molecular d del Fe^{3+} y la banda de conducción del TiO_2 , en las demás lámparas fue superior el Dióxido de Titanio sin dopar.

Palabras clave: método de Pechini, degradación azul de metileno, actividad fotocatalítica, dopaje, Dióxido de Titanio.

Introducción: El dióxido de titanio es un semiconductor sensible a la luz que absorbe radiación electromagnética en la región UV (entre 300-400nm aproximadamente). Se ha comprobado su alta capacidad oxidativa de materiales orgánicos debido a su comportamiento fotocatalizador. El TiO_2 tiene muchas aplicaciones prometedoras en diferentes campos, que van desde la óptica de los sensores de gas a través de la energía solar [1-4], hasta su capacidad purificadora de sustancias líquidas contaminadas con matrices orgánicas e inorgánicas (colorantes, metales pesados, compuestos nitroaromáticos) [5], Estas aplicaciones se pueden dividir en las categorías de "energía" y la categoría de "ambientales", muchas de las cuales no sólo son en función de las propiedades del material de TiO_2 original, sino también en las modificaciones del TiO_2 y de las interacciones de materiales de TiO_2 con el medio ambiente [6-7]. Uno de los problemas principales son los elevados requerimientos energéticos que son necesarios para ser activado el TiO_2 (radiación UV). Esta característica no permite un aprovechamiento óptimo de la radiación solar, la cual posee solo un 7% de su intensidad en la región del espectro ya mencionada. Por el contrario la radiación solar emite aproximadamente un 45% en la región del espectro electromagnético denominado visible, la cual no es cancerígena para el ser humano y su coste energético es mucho más bajo con respecto a la región del ultravioleta. Los semiconductores pueden cambiar sus propiedades eléctricas, ópticas, adsorbentes, etc gracias a la adición intencional de "impurezas" en su estructura cristalina (dopaje), el cual puede permitir la disminución en el

requerimiento energético del semiconductor para que este sea activo en un proceso fotocatalítico. Se denomina dopaje al proceso intencional de agregar impurezas en un semiconductor. El dopaje de semiconductores es conocido desde hace mucho tiempo, permitiendo cambiar y/o modificar propiedades en la estructura química a la que se está dopando, siendo posible que ocurran cambios en las propiedades eléctricas, ópticas, porosas, etc. El dopaje del dióxido de titanio con hierro ha demostrado mejoras en sus propiedades eléctricas, usando el método del sol-gel para dopar sintetizarlo. Para los compuestos con hierro se ha demostrado de manera cuantitativa y cualitativa, mejoras en sus propiedades eléctricas, causando un cambio positivo en el potencial de banda plana del TiO_2 (a bajas concentraciones de Fe/Ti) sugiriéndose que los dopajes de hierro sirvieron como trampas de estado poco profundas para el aumento de la transición de carga[8]. Una de las condiciones para realizar un dopaje, es que el dopante tenga un radio iónico similar al del átomo reemplazado en la estructura cristalina, siendo el radio iónico del Fe^{3+} de 0.654 Å, similar al del ion Ti^{4+} el cual es de 0.605 Å, por lo tanto el hierro puede ocupar posiciones sustitucionales del Ti^{4+} en la red cristalina del TiO_2 , la modificación de las propiedades ópticas con el dopaje de iones hierro se dan por dos picos existentes en el espectro uv-vis. El primer pico es cerca a los 400 nm, el cual proviene de la excitación de los electrones 3d del Fe^{3+} a la banda de conducción del TiO_2 , la cual es conocida como una transición de transferencia de carga [9,10] El otro pico cercano a los 500 nm suele atribuirse a la transición d-d del Fe^{3+} o a la transferencia de carga entre la interacción de iones hierro ($\text{Fe}^{3+} + \text{Fe}^{3+} \rightarrow \text{Fe}^{4+} + \text{Fe}^{2+}$), y es común para altas concentraciones de dopante [9,11,12]. El objetivo principal de este proyecto es poder reducir el costo energético que se requiere para activar la actividad foto catalizadora del TiO_2 mediante el dopaje de esta sustancia con átomos de hierro, utilizando el método de Pechini como método de síntesis.

Resultados: Los resultados de degradación del azul de metileno, mediante TiO_2 dopado y sin dopar bajo los tres tipos de lámpara son los siguientes:
Degradación bajo lámpara de luz blanca: Ningún catalizador dopado con hierro presento una mejor actividad fotocatalítica con respecto al TiO_2 sin dopar, esto puede deberse a que los fotones incididos en el fotocatalizador dopado son utilizados para transiciones o reacciones de óxido-reducción como la transferencia de carga entre la interacción de iones hierro [9,11,12], esta transición de transferencia de carga tiene una longitud de onda cercana a los 500 nm, similar a la radiación emitida por esta lámpara, disminuyendo así la actividad de degradación ya que estos fotones se utilizaran para reacciones alternas a las de generación del electrón-hueco usados para la fotodegradación. **Degradación bajo lámpara de luz ultravioleta:** Nuevamente ningún catalizador dopado con hierro presento mejor activada fotocatalítica con respecto al TiO_2 sin dopar, posiblemente porque los fotones son usados en transiciones o reacciones de óxido-reducción que no tienen una relación directa con el aporte electrónico que es utilizado en los procesos avanzados de oxidación, por el contrario todas estas reacciones alternas disminuyen la cantidad de electrones que son utilizados para la fotocatalisis.

Degradación bajo lámpara de luz negra: Los catalizadores $\text{Ti}_{0.9}\text{O}_{1.95}\text{:Fe}_{0.1}$, $\text{Ti}_{0.8}\text{O}_{1.9}\text{:Fe}_{0.2}$ y $\text{Ti}_{0.6}\text{O}_{1.8}\text{:Fe}_{0.4}$ presentaron una mayor actividad de fotodegradación con respecto al TiO_2 sin dopar esto se debe por la transferencia de carga que proviene de la excitación de los electrones 3d de Fe^{3+} a la banda de conducción de TiO_2 , La cual ocurre cerca a los 400 nm[9,10], la cual es la longitud de onda principal de fotones que emite este tipo de lámpara, permitiendo así que más electrones sean generados y se utilicen para producir un aumento en la actividad fotocatalítica, presentándose una mayor actividad de degradación con respecto al TiO_2 sin dopar, cabe destacar que el dopaje al TiO_2 con átomos de Fe^{3+} permite que se presente una mayor actividad fotocatalítica que los sistemas individuales de Fe^{3+} y de TiO_2 respectivamente, demostrándose que la combinación de estos dos catalizadores mediante un dopaje, a permitido generar una mayor cantidad de electrones a la hora de la degradación fotocatalítica[19].

Referencias Bibliográficas:

- [1] U.I. Gaya, A.H. Abdullah, J. Photochem. Photobiol. C: Photochem. Rev. 9 (2008) 1–12.
- [2] R.J. Tayade, R.G. Kulkarni, R.V. Jasra, Ind. Eng. Chem. Res. 45 (2006) 922–927.
- [3] M. Tong, S. Yuan, H. Long, M. Zheng, L. Wang, J. Chen, J. Contam. Hydrol. 122 (2011) 16–25.
- [4] Y. Yuan, H. Li, M. Luo, S. Qin, W. Luo, L. Li, H. Yan, Water Air Soil Pollut. 225(2014) 1881, <http://dx.doi.org/10.1007/s11270-014-1881-5> (9 pp.).

P42. Desarrollo de un material alternativo al poliestireno expandido a partir del micelio del hongo pleurotus ostreatus

Paula Andrea Ochoa Triana, Oscar Julio Medina Vargas, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia

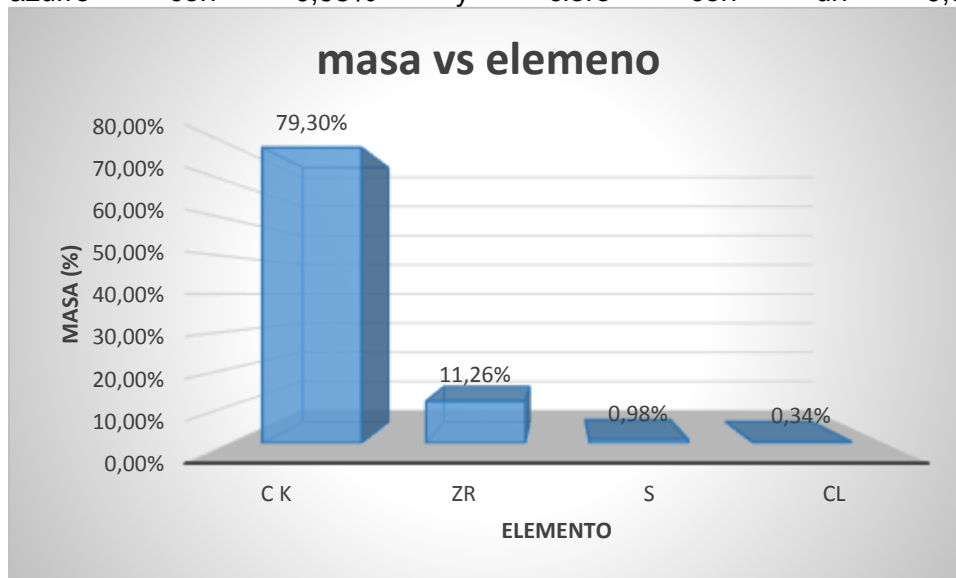
Resumen ejecutivo: El presente trabajo tiene como objetivo principal desarrollar un material alternativo al poliestireno expandido, aprovechando la quitina, polisacárido presente en el micelio (raíz) del hongo *Pleurotus Ostreatus*; esto se elaborará mediante el control reproductivo de este microorganismo en tres diferentes sustratos: Heno, bagazo de caña de azúcar y pulpa de café. Seguidamente se realizarán los análisis pertinentes para caracterizar las muestras obtenidas.

Palabras clave: Hongo, micelio, Poliestireno (EPS), sustrato, quitina.

Introducción: El poliestireno expandido es utilizado como elemento para el embalaje y empaques de diferentes objetos; este tipo de materiales presentan un problema porque su ciclo de vida es corto, su descomposición en el ambiente es muy lenta. En Colombia la composición física del producto de todos los residuos sólidos corresponde en un 13% a plásticos y afines, arrojando un valor aproximado de 3400 toneladas de desechos diarios en basureros. Este proyecto da una alternativa al poliestireno expandido, utilizando principalmente el micelio del hongo *pleurotus ostreatus* donde se pretende obtener un producto final que posea características similares al poliestireno expandido comercial. Este hongo tiene cualidades importantes que permiten aprovechar su micelio, ya que contiene 57% de carbohidratos, macronutrientes importante en la formación micelial del hongo ya que contiene pentosas, hexosas, sacarosa y amino-azúcares. Un importante factor en este proyecto es la quitina, segundo compuesto más abundante en la naturaleza tras la celulosa. Este polisacárido es el componente principal de las estructuras de protección y resistencia, proporcionando la rigidez necesaria al micelio o estructura vegetativa. Tras la investigación realizada se eligió el hongo *pleurotus ostreatus* ya que es versátil, con facilidad de crecimiento en medios lignocelulósicos, condición térmica de rango variable, brindando facilidad de crecimiento en comparación a otros hongos. Además teóricamente se conoce que todos los hongos son heterótrofos, es decir, requieren materia orgánica preformada que utilizan como fuente de energía y de carbono para la síntesis de estructuras celulares.

Resultados: A partir de la siembra del hongo *Pleurotus Ostreatus* se logró obtener composites con diferentes formas, caracterizándose por ser livianos, espumosos y de color blanco, a partir de los análisis a realizar se esperaba obtener: Prueba de densidad: para cada muestra se encontrara un valor de densidad diferente, determinando que el menor valor de densidad lo presentara la muestra obtenida en el sustrato de café, y los mayores valores

de densidad lo registrarán los composites sembrados en bagazo de caña de azúcar y heno. Porosidad aparente: al desarrollar la fórmula planteada para hallar la porosidad de aparente en los tres composites analizados, se encontrara que esta oscila entre el 59% y el 66%, encontrándose que la mejor porosidad aparente la presenta el composite desarrollado en el sustrato de café. Prueba Microestructura: en las tres muestras analizadas se encontrara en común que el elemento en mayor proporción es el carbono, y potasio con 79,30% y en menor proporción se encuentran el circonio (Zr) con un 11,26%, azufre con 0,98% y cloro con un 0,34%.



Grafica 1. Elementos encontrados en las muestras obtenidas

Con respecto a los análisis presentados anteriormente se puede analizar que el micelio desarrollado en la siembra del hongo pleurotus ostreatus en los tres sustratos tiene un alto potencial, porque es biodegradable al 100%, el micelio no es tóxico, y cumple con las principales características básicas para poder utilizarlo como medio de soporte y/o embalaje.

Referencias: Espinosa, A. & Pazmiño, V. (2016). *Elaboración de productos agroindustriales a partir de (Pleurotus ostreatus, djamor), como alternativa al poliestireno expandido.* (1st ed.). Quito, Ecuador.
 Guarín, J. & Ramirez, A. (2004). *estudio de factibilidad técnico-financiero de un cultivo del hongo Pleurotus ostreatus* (licenciatura). Potinficia Universidad Javeriana. Facultad de Ingeniería. Disponible en : <http://www.javeriana.edu.co/biblos/tesis/ingenieria/tesis79.pdf>

P43. Síntesis y determinación estructural de complejos de coordinación de sb (iii) con β -aminoácidos derivados de benzaldehído y salicilaldehído

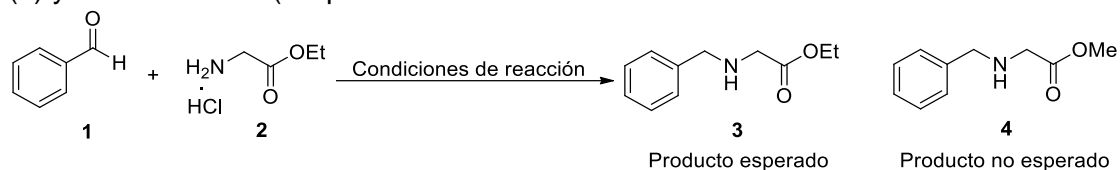
Ana Ivette Àgredo Bolaños, Edwin Flórez López, Universidad Santiago de Cali.

Resumen: Se desarrolló una reacción de condensación de aldehídos con clorohidrato del aminoéster de la glicina para dar α -iminoésteres. En presencia de NaBH_4 se realiza la reducción del grupo imino para preparar dos β -aminoésteres con rendimientos moderados a altos (hasta 91%). Posteriormente, por hidrólisis básica de los β -aminoésteres se obtienen aminoácidos N-bencilados con un porcentaje de conversión del 100%.

Palabras clave: β -aminoésteres, condensación, aminación reductiva, caracterización

Introducción: En la actualidad las medidas de control de Leishmaniasis se basan esencialmente en la quimioterapia. Ante la evidencia de que son cada vez más los casos de resistencia ante los antimoniales pentavalentes y que la aparición de resistencias se debe principalmente a la disminución de capacidad de reducción de Sb (V) a Sb (III) en presencia del parásito, hoy se mira con interés el uso directo del agente activo Sb(III). Sin embargo, debido a la cardiotoxicidad y a la intolerancia gastrointestinal de los antimoniales trivalentes, son los pentavalentes, los que tienen mayor uso terapéutico¹. Teniendo en cuenta que la combinación entre una estructura metálica y compuestos orgánicos es una de las estrategias utilizadas en la búsqueda de nuevos agentes antiparasitarios, ya que esto puede conllevar a compuestos menos tóxicos y más activos¹, permite pensar en la reducción de la toxicidad del Sb (III) con ayuda de un ligando. Un gran número de compuestos naturales y sintéticos se han probado en los últimos años en los ensayos anti-Leishmania. Sus estructuras son muy diversas. A menudo contienen heterociclos nitrogenados como: quinolinas, acridinas, fenotiazinas, pirimidinas y purinas, pero hay otros tipos de compuestos tales como derivados de anilina, flavonoides, quinonas, ciertos aminoácidos, amidas y ésteres². Es por lo anterior, que los aminoésteres y aminoácidos (derivado de aminoéster) se convierten en un compuesto orgánico interesante para acomplejar con un metal, como el Sb (III). Resaltando que existen estudios de la actividad biológica tanto de los aminésteres como de los aminoácidos, se pretende realizar la síntesis del primero a partir del Benzaldehído y Salicilaldehído para posteriormente por aminación reductiva obtener los aminoácidos. Con ambos productos se pretende coordinarlos con Cloruro de antimonio (SbCl_3) y determinar su estructura molecular por métodos espectroscópicos. Adicionalmente, siguiendo los lineamientos de la Química verde, especialmente del principio No. 5³, se pretende hacer uso de una vía de reacción en la que solo participe la sal del Sb (III) y el ligando, evitando de esa forma el uso de solventes orgánicos.

Resultados: La etapa sintética inicia con la exploración de las mejores condiciones de reacción para la obtención del éster de la glicina N-bencilada (3) a partir del éster etílico del clorhidrato de glicina (1) con el benzaldehído (2) y Salicilaldehído (Esquema



Esquema 3. Síntesis del Éster de la glicina N-Bencilada.

En el Esquema 3 se denota la posibilidad de obtener un producto no esperado, cuya cantidad cambia dependiendo de las condiciones de la reacción, por ello, en la Tabla 1 se detallan las condiciones que fueron exploradas para obtener en mayor proporción el producto 3. Los aminoácidos N-bencilados **4a** y **4b** se obtuvieron a partir de la hidrólisis básica de los respectivos aminoésteres **3a** y **3b**, dicha reacción se efectuó a temperatura ambiente empleando una mezcla de MeOH/H₂O 8:2, y un tiempo de reacción de 8 días. Al finalizar la reacción se obtiene de manera cuantitativa (100% de porcentaje de conversión) el aminoácido como un sólido blanco. Las técnicas espectroscópicas convencionales como RMN de protón y de carbono trece y espectroscopia infrarroja, permiten corroborar las estructuras tanto de los aminoácidos **4a** y **4b** como de los aminoésteres **3a** y **3b**

Referencias: Gil, E. S.; Cunha, L. C.; Goncalves, A. L. S.; R.Souza, A.; Negrón, A. C. V. *Lat. Am. J. Pharm.* **2007**, 26 (3), 454–461. del Olmo, E.; Alves, M.; Lopez, J. L.; Inchausti, A.; Yaluff, G.; de Arias, A. R.; Feliciano, A. S. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2002**, 12 (4), 659–66

P44. Aislamiento de nanofibras de celulosa y modificación de fibras vegetales a partir de residuos agroindustriales para su aplicación como refuerzo en materiales poliméricos

Santiago Valencia, Jhon Lemos, Lizeth Borrero, Natalia Diaz, Liliana Serna, Marcelo Guancha, Jaime Gálvez, Centro Nacional de Asistencia Técnica a la Industria, ASTIN – SENA, Universidad Nacional de Colombia – Sede

Resumen

En el presente estudio se propone obtener nanofibras de celulosa a partir de residuos agroindustriales (fique, cutícula de aloe vera y hoja de piña) para aplicarlas como refuerzo en hidrogeles de base acrílica y mejorar sus propiedades mecánicas (resistencia a la compresión y modulo elástico). Por otro lado, se trabaja en la funcionalización de fibras naturales de bagazo de caña de azúcar mediante reacciones de transesterificación con anhídrido maleico bajo radiación microondas y libre de disolvente para ser utilizado en materiales compuestos de matriz biopolimérica como el quitosano.

Palabras clave: nanofibras, tranesterificación, hidrogeles, materiales compuestos.

Introducción: Los hidrogeles o superabsorbentes son polímeros que presentan una estructura tridimensional entrecruzada que le permite absorber, almacenar y liberar moléculas de agua (Mohan, Murthy, & Raju, 2006; Pourjavadi & Mahdavinia, 2006). Para aplicación en la agricultura se sintetizan a base de acrilatos ya que éstos permiten incrementar el agua disponible en el suelo, inducen el crecimiento rápido, prolongan la supervivencia de las plantas bajo estrés hídrico y permiten la liberación controlada de fertilizantes (Liu et al., 2013). A pesar de su potencial aplicación, una de las principales limitaciones en el uso de hidrogeles en la agricultura es su baja resistencia mecánica (Guilherme et al., 2015; Sannino, Demitri, & Madaghiele, 2009), ya que genera una pérdida de la capacidad de hinchamiento, elasticidad y rigidez. De igual forma, los biomateriales compuestos, de potencial aplicación en el sector de los empaques, corresponden a una clase de materiales biodegradables producidos a partir de una matriz polimérica compostable reforzada con fibras vegetales; pero dichos refuerzos naturales, de fácil y económica manufactura, presentan problemas como material de refuerzo debido a su relativa hidrofiliidad y poca adhesión fibra-matriz lo que genera fragilidad y pobre estabilidad térmica (Hudson, Glaisher, Bishop, & Katz, 2015). Una de las alternativas para mejorar las propiedades mecánicas de los hidrogeles es la utilización de fibras vegetales como material de refuerzo (Rodrigues et al., 2013), por lo tanto se plantea obtener nanofibras a partir de material vegetal (residuos de aloe vera, fique y hoja de piña) que permita mejorar sus propiedades mecánicas. En cuanto a los materiales compuestos biodegradables, se propone funcionalizar o modificar bagazo de caña de azúcar (Vaidya, Gaugler, & Smith, 2016) mediante reacciones de transesterificación con anhídrido maléico bajo condiciones de radiación microondas.

Resultados: La determinación de la distribución de tamaño de las fibras se realizó en un Zetasizer, se prepararon muestras al 1% de fibra en agua destilada y se llevaron a la celda

de vidrio. Cada una de las muestras se lleva a baño de ultrasonido por 10 minutos antes de realizar la medida. El tamaño promedio para la fibra deslignificada y blanqueada para fique $4614 \pm 516,3$ nm, luego del proceso de hidrolisis con H_2SO_4 se obtuvo un tamaño de $2165 \pm 364,7$. Las muestras de fibras de aloe vera luego del proceso de hidrolisis presentan un tamaño promedio para la fibra hidrolizada de 3993 ± 189 nm. El tamaño de partícula luego del proceso del tratamiento con ultrasonido se encuentra en proceso. Hasta el momento, para las muestras se realizó análisis termogravimétrico TGA y se compararon con el TGA de una muestra de celulosa comercial. Las muestra luego del proceso de hidrolisis con H_2SO_4 para aloe y fique presentan un punto de degradación térmica alrededor de los $340^\circ C$ típico de la celulosa (Rebouillat & Pla, 2013). Sin embargo, si se compara con la muestra comercial el punto de degradación es más pronunciado lo que se traduce en mayor cristalinidad de la celulosa. La fibra de bagazo de caña de azúcar modificada bajo radiación microondas, mostró en todos los casos de relación fibra:anhídrido maleico (1:0,5; 1:1; 1:1,5; 1:2) la aparición de una banda alrededor de los 1725 cm^{-1} , en los espectros de espectroscopía IR, que corresponde a la vibración de tensión del enlace C=O del grupo carbonilo. Se encuentra en estudio determinar el grado de funcionalización en las diferentes relaciones fibra:anhídrido maleico y establecer la mejor para aplicación con mayores cantidades y/u otras fibras.

Referencias: Andrade, M., Lopez, N., Reyes, A., Echeverry, A., Molina, J., Rios, O., ... Agudelo, A. (2014). Obtención y caracterización de nanofibras de material lignocelulósico bagazo de caña de azúcar. *Revista Facultad Nacional De Agronomía*, 67, 1033–1035. Guilherme, M. R., Aouada, F. A., Fajardo, A. R., Martins, A. F., Paulino, A. T., Davi, M. F. T., ... Muniz, E. C. (2015). Superabsorbent hydrogels based on polysaccharides for application in agriculture as soil conditioner and nutrient carrier : A review. *European Polymer Journal*, 72, 365–385. <http://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2015.04.017>

P45. Compuestos de *ganoderma lucidum* y del sustrato agotado obtenidos mediante fluido súper crítico y análisis por cromatografía gaseosa y espectrofotometría de masas

Wilder Ramirez Ayala, Carlos Guevara, Universidad del Quindío

Resumen ejecutivo del trabajo: Después de cultivar experimentalmente *G lucidum* se llevaron a cabo diferentes métodos de extracción para caracterizar los compuestos bio activos altamente reconocidos en esta especie (Ácidos ganodericos y beta glucanos) mediante HPLC y CG-MS.

Resumen: La extracción de metabolitos utilizando etanol han notificado ser el enfoque más práctico para mantener la actividad de los triterpenos y beta glucanos de estas especies, así mismo los métodos de separación como las técnicas ultrasónicas y con fluido supercrítico se están utilizando actualmente para mejorar la tasa de extracción de componentes bio activos, ya que destruyen la estructura densa de las células. Sin embargo, no todos los estudios comparan diferentes procedimientos de extracción, (Nguyen 2015).

Palabras clave (máximo 5) Ganoderma, Triterpenos, Beta glucanos, Fluido supercrítico, Ultrasonido.

Introducción: Los procesos de extracción son necesarios para purificar o eliminar componentes innecesarios que se producen naturalmente en el desarrollo del hongo, mientras que permiten conservar los componentes bio activos esenciales dentro de él. Numerosos métodos de extracción han sido desarrollados con el objetivo de obtener extractos de GL con mejores rendimientos y menores costos. Sin embargo, algunos métodos presentan desventajas, tales como una disminución del rendimiento, tiempos de extracción largos y altas temperaturas de extracción. Pero las tecnologías que utilizan ultrasonidos, microondas y métodos enzimáticos han sido recientemente desarrolladas para aumentar el rendimiento en tiempos de extracción más cortos, (Sood, G., et al 2013). Junto con la técnica de extracción con fluido súper crítico (CO₂), se pretende y analizando además el sustrato agotado donde se logró la fructificación de GL, se demostraría si hay aumento en los porcentajes de componentes bio activos de un hongo cosechado en un nuevo sustrato.

Metodología: Los cuerpos fructíferos de GL y su sustrato agotado se pulverizaron y homogenizaron hasta un tamaño de 50 µm. (Thuy, N.M., et al 2015). La extracción con fluido supercrítico se llevó a cabo en el instituto de Biotecnología y Agroindustria de la Universidad Nacional de Manizales Caldas, en cooperación con el interés investigativo. Mediante solvente supercrítico (CO₂) y co solvente etanol, en condiciones de presión, flujo y temperatura secuencialmente controlados. (Domínguez., et al 2006). Análisis En el laboratorio de química de la Universidad del Quindío se realizó la cromatografía gaseosa, empleando metanol y agua como solventes y un cromatógrafo (Thermo 3000 con DAD). Y la cuantificación de los componentes bio activos extraídos de GL se compararon con estándar externo.

Diseño experimental: Los datos obtenidos serán relacionados por triplicado y sometidos a un análisis de varianza usando software recomendado.

Referencias: Dominguez, H.; Díaz, B.; Moure, A.; Parajó, J. supercritical CO₂ extraction and purification of compounds with antioxidant activity. *J. Agric. Food Chem* 2006, vol. 54 N°. 7, p. 2441- 2469.

Nguyen Minh Thuy and Nguyen Thi My Tuyen. 2015. Extraction of bioactive compounds and spore powder. Collection from *Ganoderma lucidum*. Department of Food Technology, Can Tho University, Vietnam.

P48. Evaluación del efecto de la concentración de inulina en la viscosidad de la mezcla de helado deslactosado

Samuel David González, Isabel Velasco, Juan Sebastián Ramírez, Universidad del Valle

Resumen:

Se evaluó el efecto de la concentración de inulina (prebiótico) sobre la viscosidad de un helado duro de vainilla deslactosado. Los tratamientos evaluados contenían 0, 2, 4 y 6% de adición de inulina y todas por triplicado. Se realizó el análisis con el hisullo N° 29 con varrido de velocidad de rotación de la aguja ascendente de 5 a 50 RPM. Por medio de un análisis de varianza (ANOVA) se encontró que hubo diferencias significativas entre los tratamientos 2, 4 y 6% de adición de inulina con respecto al tratamiento patron (0%), lo cual indica que al adicionarle inulina al helado duro de vainilla deslactosado su viscosidad disminuye, esto es debido al tipo de inulina usada.

Palabras clave (máximo 5): Inulina, prebiótico, helado, viscosidad aparente.

Introducción: La inulina es un fructooligosacárido (FOS) con funciones prebióticas y propiedades tecnológicas. Ofrece múltiples usos como ingrediente en la industria farmacéutica y de alimentos; siendo tendencia en algunos productos como los helados. Los objetivos del trabajo fueron, evaluar el efecto de la concentración de inulina sobre la viscosidad de la mezcla de helado deslactosado de vainilla, determinando la viscosidad instrumental para cada tratamiento y verificando estadísticamente las diferencias entre tratamiento.

Resultados: El valor de la viscosidad aparente para los tratamientos varió en un rango de 1842 cP y 3039 cP a una velocidad de 20 s^{-1} ; todas las mezclas presentaron un índice de comportamiento de flujo (n) menor a 1, indicando un comportamiento reológico no Newtoniano-pseudoplástico; puesto que, su viscosidad decrece al aumentar la velocidad de corte (1, 3, 5, 6). No se encontraron diferencias significativas para la viscosidad ($P < 0,05$) entre los tratamientos con adición de 2, 4 y 6%. La prueba de comparación múltiple de Tukey mostró que el tratamiento correspondiente al 0% de adición presentó diferencia significativa con los otros tratamientos (2%, 4% y 6%); obteniendo también el mayor valor de viscosidad siendo éste de 3039 cP. Los resultados indicaron que el efecto de la concentración de inulina en el comportamiento de flujo y en la viscosidad difieren a los reportados en estudios anteriores. El-Nagar et al. (2002) evaluaron las características reológicas de un helado de yogur bajo en grasa con inulina en concentraciones de 5%, 7% y 9%, encontrando que los valores del índice de consistencia y la viscosidad aparente aumentan con el aumento de la concentración de inulina. Akin, y Kirmaci (2007) también investigaron los efectos de la inulina (1% y 2%) en algunas propiedades físicas del helado probiótico; donde la adición de inulina aumentó el tiempo de derretimiento y la viscosidad.

La viscosidad en el helado deslactosado se vio afectada significativamente con la adición de inulina. El comportamiento de flujo de todas las muestras mostró su naturaleza de pseudoplástico; la ley de potencia fue el mejor modelo para predecir su comportamiento de flujo.

Referencias:

1. Aime DB, Arntfield SD, Malcolmson LJ, Ryland D. Textural Analysis of fat reduced vanilla ice cream products. *Food Research Int.* 2001; 34 (2-3): 237-246.
2. Akin, M. B., Akin, M. S., & Kirmaci, Z. (2007). Effects of inulin and sugar levels on the viability of yogurt and probiotic bacteria and the physical and sensory characteristics in probiotic ice cream. *Food Chemistry*, 104, 93-99.
3. Dickinson E. Hydrocolloids as emulsifiers and emulsion stabilizers. *Food Hydrocolloid.* 2009; 23 (3): 1473-1482.

P49. Síntesis de las perovskitas Na_2TiO_3 y K_2TiO_3 dopadas con lantano y evaluación de la actividad fotocatalítica en la degradación de fenol.

Luis Fernando Patiño Correa, Jhonatan Corrales Jaramillo, Hoover Valencia

Resumen ejecutivo del trabajo:

El presente proyecto consiste en la evaluación del efecto del dopaje de un semiconductor (perovskita) sobre el ensanchamiento de la banda de absorción hasta radiaciones correspondientes al visible, para su posterior evaluación como fotocatalizador frente a una molécula que se ha estudiado bastante en degradaciones como es el fenol. Se sintetizaron los titanatos de sodio y potasio y se doparon con diferentes concentraciones de lantano, se proseguirá con las degradaciones bajo radiación ultravioleta del fenol usando como control el TiO_2 y realizando el seguimiento por cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC).

Resumen:

En el presente trabajo se realizó el dopaje con lantano de las perovskitas Na_2TiO_3 y K_2TiO_3 por el método de Pechini, para determinar su actividad fotocatalítica en la degradación del fenol bajo radiación NUV y de luz visible, ambas seguidas por HPLC a través de algunos de los intermediarios formados (catecol, resorcinol e hidroquinona). La degradación del fenol será estudiada en medio acuoso y posteriormente se determinará la influencia del pH sobre el proceso de fotocatalisis.

Palabras clave (máximo 5): fotocatalisis heterogénea, fenol, radiación electromagnética.

Introducción: Uno de los retos de la fotocatalisis heterogénea, es la búsqueda de nuevos compuestos que absorban en el visible y sean útiles para la degradación de materia orgánica. Bajo esta premisa, se llega hasta las perovskitas; compuestos cerámicos, con estructuras cristalinas estudiadas y susceptibles a modificaciones estructurales que comprometen sus funciones magnéticas y eléctricas. Al hablar de fotocatalisis heterogénea se consideran dos componentes principales, la luz y el catalizador, ambos necesarios para alcanzar o acelerar una reacción química específica. Los fotocatalizadores o compuestos empleados en este proceso, son materiales sólidos con propiedades de semiconductores, y es allí donde tienen el papel protagónico las perovskitas, las cuales, al ser susceptibles a dopajes, pueden ser manipuladas para ensanchar su banda de absorción y ser aprovechables en la región visible del espectro electromagnético. Las perovskitas han sido utilizadas en diversas aplicaciones entre las que resaltan: la catálisis para la producción de hidrógeno a partir de vapores de etanol del bimetálico Co-Ni soportado en LaFeO_3 , y de glicerol con LaCoO_3 dopado con Pt; En catalizar la oxidación de compuestos orgánicos como el 1,2 dicloroetano usando LaMnO_3 a temperaturas entre los 400 °C y 1000 °C; como cátodos en pilas de óxidos sólidos de temperatura intermedia entre otras. Nótese que varias de las anteriormente mencionadas se encuentran dopadas con elementos comunes, también existen evidencias de dopajes con los elementos denominados tierras raras. Una de las ventajas de dopar con tierras raras es el desplazamiento en las bandas de absorción del material cerámico y responder a longitudes de onda del ultravioleta incluso del visible.

Una de las características que ha mostrado el dopaje con las tierras raras es la capacidad de realizar fotocatalisis. A diferencia de la catálisis normal no se requiere de altas temperaturas, de hecho, en los trabajos reportados de fotocatalisis todos se han evaluado a temperatura ambiente y bajo radiación ultravioleta o visible; lo cual se traduce en un gran ahorro en el coste energético. Por otra parte, el sistema de nanopartículas de TiO_2 dopados con neodimio utilizados para la degradación del 4-clorofenol en agua, fue evaluado en primer lugar con azul de metileno obteniendo más de un 80% de degradación. Otra investigación consistió en la degradación de la cafeína de las aguas residuales, en donde el sistema LaTiO_2N presento los mejores resultados removiendo el 80% de la cafeína y un 55% removiendo el carbono orgánico total (COT).

Metodología:

Síntesis del catalizador

Se sintetizan los fotocatalizadores en estado sólido por medio del método precursor polimérico de Pechini, con el cual se pueden obtener perovskitas con las características requeridas. El método de Pechini consiste en formar compuestos con tamaño de partícula pequeño, en primera instancia se emplean las sales metálicas y compuestos orgánicos requeridos, luego se calienta con agitación constante para realizar la formación del gel que posteriormente somete a una calcinación para liberar los compuestos formados. En primer lugar se realiza el tratamiento del óxido de Lantano con el ácido nítrico para obtener la sal del compuesto que es requerida en esta síntesis seguido de una evaporación, se deja enfriar y se procede con la adición del metanol que es el solvente de la reacción, se empieza la agitación hasta la completa disolución de la sal y luego se adiciona el etilenglicol hasta formar una solución homogénea, se adicionan a continuación el ácido cítrico, el carbonato de potasio y el cloruro de titanio, las relaciones estequiometrias que se deben tener en cuenta son: 4 moles de ácido cítrico / 1 mol Ti, 6 moles de etilenglicol / 1 mol Ácido cítrico, Los carbonatos se adicionan con el 100% de exceso. Se continúa la agitación y se calienta hasta 80°C , en este punto se retira el agitador debido a que ya se empieza a formar el gel, se continúa calentando hasta 130°C hasta que solo se observe gel (poca evaporación). Con el polímero obtenido, se procede a realizar la segunda etapa del proceso sintético. El gel se somete a una precalcinación en la mufla a una temperatura de 400°C durante dos horas, posteriormente debe ser retirado de la mufla para ser macerado en el mortero de ágata utilizando un poco de acetona. Luego de obtener el sólido macerado se lleva nuevamente a la mufla a una temperatura de 800°C por un tiempo de 12 horas. Al terminar el tiempo en la mufla se debe lavar el producto con agua, filtrar y secar para finalmente obtener el compuesto de interés. Es importante destacar que todos los compuestos de interés, se deben sintetizar bajo las mismas condiciones de temperatura, y tiempos de reacción. Se realizarán seis síntesis, empezando por las perovskita K_2TiO_3 y Na_2TiO_3 , que se van reemplazando parcialmente el catión por lantano hasta obtener la perovskita $\text{LaTiO}_{3.5}$. El metanol requerido como medio debe ser suficiente para que todas las sustancias químicas se encuentren en solución.

Actividad fotocatalítica

Cada muestra se evalúa en un reactor con una lámpara que emite en el ultravioleta cercano, en un beaker de 100 mL se adicionan 60 mL de una solución de fenol 10 ppm y 42 mg del catalizador (0.7g/L de catalizador). Este proceso se hace durante 3 horas con el fin de evaluar la cinética de degradación. Antes de empezar la acción catalítica, se debe establecer el equilibrio de adsorción mediante agitación durante 30 minutos sin aplicarle radiación. Para la evaluación de la reacción se toma una alícuota de la solución de reacción, se centrifuga a 3000 rpm durante 1 minuto, se filtra en los microfiltros de 0,2 mm de diámetro de poro y se dispone en un vial para su posterior análisis en HPLC. Para el seguimiento de la reacción por esta técnica, se realizará la medición de 3 intermediarios que se producen a medida que la degradación va ocurriendo, estos son el catecol, la hidroquinona y resorcinol que se miden a la longitud de onda de 220 nm, con una fase móvil de Acetonitrilo-Agua bajo un gradiente de concentración con la columna C18, en un tiempo de corrida de 15 minutos.

Referencias: Conagua. Estadísticas del Agua en México. *Conagua*. 2014;2014:242. <http://www.conagua.gob.mx/CONAGUA07/Publicaciones/Publicaciones/EAM2014.pdf>.

2. Malato S, Maldonado MI, Fernández-Ibáñez P, Oller I, Polo I, Sánchez-Moreno R. Decontamination and disinfection of water by solar photocatalysis: The pilot plants of the Plataforma Solar de Almería. *Mater Sci Semicond Process*. 2016;42:15-23. doi:10.1016/j.mssp.2015.07.017

P50. Inmovilización de nanopartículas de TiO_2 modificadas con nitrógeno con absorción de luz visible, sobre quitosano y sus aplicaciones como superficies autolimpiantes inducidas por luz

Juliana Perez, Paula Osorio, Julián Rengifo Herrera, Universidad Tecnológica de Pereira

Resumen ejecutivo del trabajo: El principal objetivo de este trabajo es inmovilizar nanopartículas de TiO_2 modificado con nitrógeno sobre películas de quitosano, para evaluar su actividad como superficies autolimpiantes bajo diferentes tipos de irradiación, UV y visible.

Resumen: El presente trabajo busca inmovilizar nanopartículas de TiO_2 en fase anatasas modificadas con nitrógeno, sintetizadas a partir del método sol-gel sobre una película de quitosano, compuesto desacetilado de la quitina, el cual es un biopolímero estructural sumamente abundante en la naturaleza. La síntesis mediante el método sol-gel, se llevará a cabo a temperatura ambiente en condiciones ácidas en las etapas de hidrólisis y condensación, y, el tratamiento térmico se realizará a 500°C durante 1h. La caracterización de las nanopartículas será realizada mediante técnicas como espectroscopia UV-Visible de reflectancia difusa (DRS), Difracción de rayos X (DRX) resonancia magnética nuclear para sólidos utilizando ángulo mágico y núcleos de ^{15}N (^{15}N MAS NMR), espectroscopia Raman, espectroscopia fotoelectrónica de rayos X (XPS), espectroscopia de infrarrojo de reflectancia difusa (DRIFT IR), microscopia electrónica de barrido acoplada a espectroscopia de energía dispersiva de rayos X (SEM-EDAX), área superficial específica (BET), mientras que las películas serán caracterizadas mediante SEM-EDAX, microscopia de fuerza atómica (AFM), DRX, XPS y microscopia de transmisión electrónica (TEM). La actividad autolimpiante fotoinducida se evaluará utilizando el colorante verde de malaquita, haciendo seguimiento de su decoloración a través de espectroscopia DRS bajo luz UV y visible a 455 nm.

Palabras clave (máximo 5): TiO_2 dopado con nitrógeno, superficies autolimpiantes, luz visible, quitosano, sol-gel.

Introducción: El TiO_2 , al ser iluminado por luz UV ($\lambda < 400$ nm) induce una separación de carga o formación de pares electrón/hueco como resultado de la transferencia de un electrón desde la banda de valencia a la banda de conducción; tanto los electrones como los huecos pueden migrar a la superficie del TiO_2 para participar en reacciones redox, que finalmente generan formas reactivas de oxígeno como los radicales $\cdot\text{OH}$ y el radical superóxido ($\cdot\text{O}_2^-$) y el $^1\text{O}_2$ [4-6], las cuales son aprovechados en la oxidación de contaminantes. Sin embargo, el uso de TiO_2 en este tipo de aplicaciones presenta una gran desventaja y es su falta de absorción de luz visible [7,8]. La fabricación de superficies bactericidas y autolimpiantes conteniendo TiO_2 ha sido reportada en la literatura. A finales del siglo XX y principios del XXI, el grupo liderado por el Dr. Akira Fujishima en la Universidad de Tokio en Japón, reportó la síntesis y la evaluación fotocatalítica de estos materiales en la inactivación de microorganismos [9-11]. En primera instancia el TiO_2 tiene que ser inmovilizado en un soporte, generalmente los más utilizados han sido vidrio, acero inoxidable, polímeros de silicona y cerámicos. Los materiales inmovilizados sobre superficies cerámicas mostraron una buena actividad fotocatalítica en la eliminación (99.9% en todos los casos) de *Staphylococcus aureus*, *Pseudomonas aeruginosa* y *Escherichia coli* [12]. Además los trabajos desarrollados por Fujishima pusieron en evidencia otra de las importantes características de estas superficies de TiO_2 , su superhidrofilicidad [11]. Esto significa que estas superficies no repelen el agua cuando son iluminadas con

luz UV, sin embargo al detener la irradiación, la superficie reestablece su hidrofobicidad. Esta característica ayuda también a la eliminación de sustancias químicas, sobre todo de origen orgánico en contacto con estos materiales, otorgándoles capacidades autolimpiantes. La inmovilización de TiO₂ sobre soportes poliméricos ya ha sido explorada en la literatura y generalmente se basa en la funcionalización química del polímero, usando técnicas con cierto grado de complejidad como radiofrecuencia y UV-C al vacío [13, 14]. Dicha modificación crea grupos funcionales -COO⁻ en la superficie del polímero permitiendo una fácil interacción electrostática entre esta última y el TiO₂ [13] (al cual se le puede modificar su carga superficial variando el pH de la solución). Recientemente el Dr. Cesar Pulgarin exploró un método sencillo y práctico para inmovilizar TiO₂ en polímeros, el cual consiste simplemente en la irradiación de suspensiones acuosas a pH ácido conteniendo el semiconductor y un film de polímero [15, 16]. A pH ácido, las partículas de TiO₂ tendrán una carga parcial positiva (Punto isoeléctrico de anatasa TiO₂ = 6.0).

Metodología: 1. *Reactivos:* Tetraisopropóxido de titanio (TTIP, 97%), quitosano (mediano peso molecular), urea (99.99%), etanol (99,5%), ácido clorhídrico (HCl, 37%), ácido acético (CH₃COOH, 100%), verde de malaquita. 2. *Síntesis de nanopartículas de TiO₂:* El TiO₂ se sintetizará disolviendo 5 mL de TTIP y 95 mL de etanol. Dicha solución se mezclará mediante agitación vigorosa con otra solución de HCl (catalizador ácido) y agua. Como precursor del dopaje con nitrógeno se usará urea. Para la solución de quitosano se disolverá en CH₃COOH al 2% y se adicionará gota a gota a la solución anterior. El sol preparado se deja envejecer hasta la obtención del gel, el cual debe lavarse con agua desionizada y etanol. El tratamiento térmico se realizará a 500 °C durante 1h. 3. *Caracterización de las nanopartículas:* Se efectuará la caracterización química, textural y fisicoquímica de los sólidos obtenidos con el objeto de conocer sus principales propiedades. Fundamentalmente, se utilizará, microscopía electrónica de barrido (SEM), espectroscopía fotoelectrónica de rayos X (XPS), espectroscopía de reflectancia difusa UV-visible (DRS), espectroscopía Raman de transformada de Fourier (FT-Raman), espectroscopía de infrarrojo de transformada de Fourier (FT-IR), difracción de rayos X (XRD) entre otras. 3. *Síntesis de películas de quitosano-TiO₂ modificado con nitrógeno:* Las nanopartículas modificadas de TiO₂ serán adicionadas en un porcentaje peso a peso de 30% a una solución conteniendo quitosano (1%) en ácido acético. Esta solución será sonicada durante 15 minutos y posteriormente, el solvente será evaporado obteniendo así las películas. 4. *Caracterización de las películas:* Estas películas serán caracterizadas por microscopía de barrido electrónica (SEM), espectroscopía fotoelectrónica de rayos X (XPS), microscopía de fuerza atómica (AFM), difracción de rayos X, espectroscopía DRS. 5. *Evaluación de las propiedades autolimpiantes de las películas bajo diferentes longitudes de onda:* Para evaluar la actividad como superficies autolimpiantes se utilizarán soluciones etanólicas 1x10⁻⁴ M de verde de malaquita, de las cuales se tomarán 50 µmL y se esparcirán sobre una lámina de 2x2 cm de la película de quitosano con TiO₂ modificado. Se dejará secar a temperatura ambiente y posteriormente la lámina se colocará sobre la base de una caja de Petri y se irradiarán con una lámpara de Xenon Newport la cual contiene diferentes tipos de filtros para obtener longitudes de onda del UV y del visible. A determinados tiempos de irradiación, se extraerá la lámina y se realizarán análisis de espectroscopía de reflectancia difusa de UV-Vis (DRS) usando un espectrofotómetro UV-Vis con un aditamento DRS.

Referencias Bibliográficas:[1] Y. Wang, B. Hu, C. Hu, X. Zhou, Mater. Sci. Semicond. Process. 40 (2015) 744–751, [2] E.M. Samsudin, S.B.A. Hamid, J.C. Juan, W.J. Basirun, A.E. Kandjani, Appl. Surf. Sci. 359 (2015) 883–896, [3] Y.S. Sakhare, S.V. Bhoraskar, V.L. Mathe, A.U. Ubale, Mater.

P51. Síntesis y caracterización de $K_2La_2Ti_3O_{10}$ dopado con neodimio para modificar su gap óptico

Vladimir Arias, Hoover Valencia, Universidad Tecnológica de Pereira

Resumen: El método del Complejo Polimerizable se empleó para preparar diferentes compuestos tomando como base el compuesto $K_2La_2Ti_3O_{10}$, los compuestos fueron obtenidos por sustitución parcial, en diferentes porcentajes (25% – 50% – 75% y 100%) del Lantano por Neodimio, permitiendo identificar las síntesis como fases predominantes a Ruddlesden – Popper además encontrándose comportamientos isoestructurales que permitieron ser refinadas por el método Rietveld empleando el software FullProf Suite, las síntesis de 0 y 50%, donde también se aplicó el concepto de la Suma de Valencia para verificar la viabilidad de la estructura. Las fases que lograron ser identificadas y evaluadas fueron las fases hidratadas. Estos compuestos pueden intercalar moléculas de agua a nivel de las intercapas de perovskitas formadas por octaedros de TiO_6 . Estas modificaciones buscan mejorar la facilidad con la cual el compuesto puede aprovechar la energía para promover electrones desde la banda de valencia hasta la de conducción, superando el ancho de la brecha entre ellas (Banda Gap). Por medio de la técnica de Reflectancia difusa se logra evaluar el intervalo de radiación electromagnética que es absorbida para promover electrones desde la banda de valencia a la banda de conducción. El análisis fue realizado desde los 5000 hasta 40000 cm^{-1} , involucrando las regiones Infra Roja, Visible y Ultra Violeta. Las modificaciones sustitucionales en la estructura permitieron mejorar la capacidad de absorción de la radiación desde intervalos con menor energía del espectro electromagnético, estableciendo que la sustitución de átomos de Lantano por Neodimio establece “escalones energéticos” que permite la promoción de electrones desde la banda de valencia hacia la banda de conducción.

Introducción: Desde el momento en que diferentes compuestos con propiedades como la conducción de la corriente fueron identificados, se hizo énfasis en la promoción de electrones a niveles energéticos superiores por medio del suministro de energía. Muchos científicos iniciaron un camino investigativo bastante productivo y novedoso, que hasta nuestros días ha permitido grandes avances tecnológicos. La búsqueda se basa en hacer cada vez más eficientes los materiales para alcanzar una menor pérdida en el transporte de la energía y facilitar otros fenómenos derivados.

Resultados: Por de la técnica de Reflectancia difusa logra evaluarse el tipo de radiación que es absorbida identificada por su número de onda, el análisis se establece desde los 5000 hasta 40000 cm^{-1} , involucrando las regiones Infra Roja, Visible y Ultra Violeta, encontrándose absorción de la radiación desde la síntesis con 25% de Lantano sustituido hasta la síntesis $K_2Nd_2Ti_3O_{10}$. Las modificaciones sustitucionales en la estructura permiten mejorar la capacidad de absorción de la radiación de regiones mucho menos energéticas del espectro electromagnético, que no modifican la banda gap definidas por los elementos que constituyen en su mayoría cada síntesis; pero manifiestan que el reemplazo de átomos de Lantano por Neodimio establecen “escalones energéticos” que permiten la promoción de electrones desde la banda de valencia hacia superiores que en ausencia de átomos

como estos requieren de valores energéticos mayores para desarrollar este fenómeno en un solo paso.

Referencias: Nishio,Tsuchiya. Sol–Gel Processing of Thin Films with Metal Salts. . In: Sakka S, editor. Handbook of sol-gel science and technology: processing, characterization and applications. New York: Kluwer Academic Publishers; 2004. B. V. Beznosikov and K. S. Aleksandrov. Perovskite- Crystals of the Ruddlesden–Popper Series. *Crystallography Reports, Vol. 45, No. 5, 2000*Like

P52. Cuantificación de metales y parámetros fisicoquímicos indicadores de contaminación del agua de las plantas de tratamiento puerto mallarino y cañaveralejo.

Juan Sebastian Sanchez Quiroz, Héctor Alfonso Melo Vallejo, Jorge Enrique Castillo,
Universidad Santiago de Cali.

Resumen: La exposición de microorganismos autóctonos a ecosistemas contaminados con metales y con desechos domésticos, ha permitido la aparición y la selección de bacterias resistentes a varios antibióticos de uso común. Esta respuesta microbiana constituye un fenómeno ambiental de selección natural para la sobrevivencia de los agentes biológicos. En el caso de los sistemas naturales de agua, la contaminación se agrava por el incremento de las poblaciones humanas en sus márgenes, y por tanto su derivada intensificación de; que adecuan bioquímicamente simbiosis entre el ecosistema y su medio. contaminación química, que hace corresponder a sistemas acuáticos tan grandes como el del río Cauca, y a características intrínsecas de estos como el DBO y DQO Además, el uso indiscriminado de antibióticos ha permitido que algunas bacterias generen procesos adaptativos, que finalmente se desarrollen con mecanismos de resistencia microbiana a estos compuestos, con seria repercusión en los humanos y comprometimiento la calidad higiénico-sanitaria del medio ambiente. Lo anterior conlleva en cadena a austeridad de oxígeno disuelto y otras propiedades fisicoquímicas del agua, dejando a microorganismos oportunistas poblar el medio, y ya por cruzamiento de genes y/o mutación de estos se desemboca en el problema de esta investigación.

La contaminación química puede evidenciarse, también, por emanación de agentes de contaminación casi constante al medio por fuentes naturales. Estos van generando una presión interna sobre los constituyentes micro del agua que obliga a semi reacciones sucesivas ocurrir permanentemente. Por tanto y por último, presión química provoca excitación en actividad biológica presente en estos medios acuáticos, permitiendo, por selección natural, una mutación de patógenos a nuevas especies que comprometen cada vez más la inocuidad y salubridad pública de comunidades dependientes de ecosistemas acuíferos; tal como Cali al río Cauca

Introducción: Una fuente de agua como lo es el río Cauca representa un cuerpo hídrico importante en la ciudad de Cali, y es quizás el que mayores problemas genera sanitariamente al departamento del Valle del Cauca. El río es fuente de abastecimiento del 75% de agua potable para la ciudad y es de uso de un sin número de habitantes e industrias aledañas al río. Uso, que la mayoría de veces, no se le realiza un tratamiento adecuado antes del vertimiento, permitiendo la adaptación de microorganismos patógenos de gran importancia en salud pública

Este comportamiento de los microorganismos frente a los antibióticos, ha tenido un efecto colateral en la expresión de la resistencia a metales pesados a consecuencia de la presencia de genes en un mismo plásmido, que pueden conferir coresistencia a estos compuestos debido a que entre los contaminantes más abundantes se encuentran los

metales pesados. Estos constituyen un riesgo serio para el medio ambiente, ya que son sustancias con una gran estabilidad química ante los procesos de biodegradación, por lo que los seres vivos son incapaces de metabolizarlos, generándose una contaminación por bioacumulación y un efecto multiplicador en la concentración del contaminante en la cadena trófica.

Metodología: **Obtención de la muestra:** Las muestras simples de agua residual del río y potable de las plantas de tratamiento serán obtenidas a partir de recolección puntual, en un recipiente de vidrio ámbar y estéril de 500 ml protegido con tapa de teflón, totalmente llena, para los análisis fisicoquímicos, y envases de plástico o vidrio del mismo volumen cubierto con papel para los análisis microbiológicos. Cabe aclarar, los envases para ambos fines; análisis, serán almacenados en refrigerador a 4°C, donde máximo una semana de almacenamiento para análisis fisicoquímicos y tres días para análisis microbiológicos.

Para la toma de aguas residuales se seguirán a las recomendaciones sugerida por el Instituto de Hidrografía, Meteorología y Estudios Ambientales (IDEAM). Los puntos de muestreo que se realizarán en el Río Cauca serán: drenaje del canal sur, bocatoma de la planta de Puerto Mallarino y Río Cauca y en la planta de tratamiento Cañaveralejo (PTAR) (ver gráfica No 1).



Gráfica No 1. Mapa de la Trayectoria del Río Cauca su paso por la ciudad de Cali. Los círculos señalan los sitios de muestreo.

Resultados: Acorde a la estandarización de técnicas como la de espectrofotometría de absorción atómica arrojo en muchos de los casos; en los metales, coeficientes de correlación por encima de 0,9990. Para poder llegar a esa estimación, se manejó una aproximación de la posible desviación que puede tener la lámpara de cátodo por metal y los patrones estándares. Por tanto se realizó un gráfico de comportamiento en la región

baja y media en una curva de calibración, ya evaluada general del metal a diferentes concentraciones. Al fin y al cabo pronosticaba, mediante prueba Q, que datos tomar como dudosos y cuáles no. Las otras técnicas de determinación fisicoquímica, la estandarización es necesaria solo y cuando se analiza la muestra; es decir se toma un blanco, un patrón y una muestra para saber el tipo de variación en que el método puede dar.

Al cabo del primer muestreo, aplicado en 4 diferentes zonas ya descritas en la metodología y su modo de colección, los resultados obtenidos en la técnica montada de absorción atómica, se obtuvo:

- En ninguno de los sitios muestreados se encontró cadmio y manganeso
- Las muestras del Río Cali y del río Meléndez no se encontró plomo
- Se encontró mayor concentración de hierro y zinc en la parte de la bocatoma del canal sur
- La muestra del canal sur tuvo mayoría en concentración en todos los metales identificados

Respecto a las pruebas fisicoquímicas, fue la muestra del canal sur cual tuvo mayor porcentaje de sólidos. Y de nitrógeno.

Se toma como hipótesis, habiendo solo hecho análisis sobre el primer muestreo, las muestras de canal sur y de la PTAR – planta de tratamiento de aguas residuales – son una de las más afectadas por contaminación química transmitida. Respecto a la muta génesis biología de organismos entéricos, el aislamiento microbiano y caracterización genotípica indico mayor sobre poblamiento de bacterias en caldo nutritivo y agar. Claro que, en los diferentes agar, en donde más dio resultado de crecimiento microbiano, independientemente del tipo de agra, el agar nutritivo mostro en común salmonella.

Referencias: (1) Alos J. Resistencia bacteriana a los antibióticos: una crisis global. En: Revista enfermedades infecciosas y microbiología clínica (2014). EIMC-1218 p. 1-8. ISSN 0213-005X. (2) Wright GD. Antibiotic resistance in the environment: a link to the clinic? Curr Opin Microbiol. 2010;13:589–94. (3) Rivera-Tapia JA. Environment and health. An Med Asoc Med Hosp ABC 2003; 48: 223-7.